На правах рукописи

## Стамов Любен Иванович

## Математическое моделирование неравновесных процессов детонации и горения, а также переходных режимов на многопроцессорных ЭВМ

## Специальность 01.02.05— «Механика жидкости, газа и плазмы»

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук».

Научный руководитель:	Смирнов Николай Николаевич доктор физико-математических наук, профессор, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, профессор	
Научный консультант:	Рыбакин Борис Петрович доктор физико-математических наук, Федеральный научный центр Научно-исследо- вательский институт системных исследований Российской академии наук, ведущий научный сотрудник	
Официальные оппоненты:	<b>Якуш Сергей Евгеньевич,</b> доктор физико-математических наук, Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлин- ского Российской академии наук, директор	
	Медведев Сергей Павлович, доктор физико-математических наук, Федеральный исследовательский центр хими- ческой физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, главный научный сотрудник	
Ведущая организация:	Объединенный институт высоких температур Российской акалемии наук	

Защита состоится 13 мая 2021 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 002.024.03 при ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и на сайте https://keldysh.ru.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4, ученому секретарю диссертационного совета Д 002.024.03.

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_ 2021 года.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.024.03, кандидат физ.-мат. наук

Корнилина Марина Андреевна

## Общая характеристика работы

Актуальность темы. Настоящая работа посвящена проведению вычислительного моделирования неравновесных нестационарных процессов детонации и переходных режимов на многопроцессорных электронновычислительных машинах (ЭВМ) и разработке для этих целей специализированного программного комплекса.

Процессы горения являются одними из первых, с которыми столкнулась человеческая цивилизация на пути своего развития, и они всегда играли (и продолжают играть) в нем важную роль. Несмотря на их многочисленные научные исследования и богатый накопленный теоретический и экспериментальный опыт, многие вопросы до сих пор раскрыты не достаточно полно ввиду сложности и многомасштабности протекающих процессов.

Существует несколько наиболее приоритетных направлений исследований процессов горения и детонации горючих смесей. Одним из таких направлений является разработка различных двигательных установок. Под установками понимаются как двигатели внутреннего сгорания, так и различные типы реактивных и ракетных двигателей, применяемых во многих областях человеческой деятельности. Причем, исследования могут проходить как в направлении оптимизации конструкций уже существующих систем с целью повышения их экономичности и увеличения производительности<sup>1</sup>, так и для разработки принципиально новых двигательных устройств. Последнее является более перспективным в силу того, что в настоящий момент повсеместно используемые системы достигли достаточно высоких показателей эффективности и дальнейшее их улучшение требует огромных затрат. Например, весьма многообещающими являются двигатели, основанные на детонационном сжигании топлива<sup>2</sup>.

Среди других направлений исследований процессов горения можно выделить задачи пожаро- и взрывобезопасности жизнедеятельности. Например, при использовании различных типов топлив возникают проблемы с их хранением и транспортировкой<sup>3</sup>. Другой важной и актуальной является проблема взрывоопасности в шахтах и безопасной работы различных

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Alexeev M. M., Semenov O. Y., Yakush S. E. Experimental Study on Cellular Premixed Propane Flames in a Narrow Gap between Parallel Plates // Combustion Science and Technology. 2019. Vol. 191, no. 7. P. 1256—1275.

 $<sup>^2</sup>$  Wolanski P. Detonative propulsion // Proceedings of the Combustion Institute. 2013. Vol. 34, no. 1. P. 125—158; Anand V., Gutmark E. Rotating detonation combustors and their similarities to rocket instabilities // Progress in Energy and Combustion Science. 2019. Vol. 73. P. 182—234.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Махвиладзе Г. М., Роберте Д. П., Якуш С. Е. Образование и горение газовых облаков при аварийных выбросах в атмосферу // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33, вып. 2. С. 23—38; Якуш С. Е. Моделирование физико-химических явлений при промышленных авариях и пожарах // Актуальные проблемы механики. 50 лет Институту проблем механики им. А.Ю.Ишлинского РАН. М.: Наука, 2015. С. 223—235.

технических устройств<sup>4</sup>. Еще одной актуальной проблемой является проблема лесных пожаров<sup>5</sup>.

Проведение различных физических экспериментов (причем не только в рассматриваемой области) связано с рядом трудностей. Одной из которых является высокая стоимость проведения некоторых экспериментов. К примеру, создание натурного образца реактивного двигателя является весьма ресурсозатратной процедурой. Другой проблемой может быть сложность или даже невозможность проведения самого эксперимента или какой-либо его части (чаще всего техническая), либо его слишком высокая длительность. Использование вычислительного моделирования позволяет решить часть этих проблем, однако, при этом возникают сложности другого характера.

Если рассматривать задачи физико-химической газовой динамики, то использование полных кинетических механизмов при моделировании горения различных топлив требуют огромных вычислительных ресурсов. Использование редуцированных механизмов позволяет сократить затраты, но всё равно объемы расчетов остаются достаточно большими и требуют применения мощных специализированных вычислительных средств. Использование таких систем подразумевает применение различных технологий распараллеливания, что, в свою очередь, накладывает определенные требования на разрабатываемые алгоритмы и программное обеспечение. Помимо этого создаваемые программы должны учитывать специфику рассматриваемых систем дифференциальных уравнений. К примеру, системы уравнений химической кинетики являются жесткими, и их решение необходимо осуществлять специализированными методами.

Данная работа посвящена вычислительному моделированию на современных многопроцессорных системах неравновесных нестационарных процессов детонации и переходных режимов, протекающих при отражении и фокусировке ударных волн в химически реагирующих газовых средах. С этой целью был разработан специализированный программный пакет и проведена его проверка на ряде тестовых задач. Были исследованы процессы, протекающие в достаточно хорошо изученных на практике водородовоздушных смесях, хотя сам разработанный комплекс программ позволяет работать с любыми горючими смесями.

Целью данной работы является проведение исследований процессов горения и детонации газовых смесей, возникающих в результате отражения

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Умнов А. Е., Голик А. С., Палеев Д. Ю., Шевцов Н. Р. Предупреждение и локализация взрывов в подземных условиях. М.: Недра, 1990. С. 286.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Кулешов А. А., Мышецкая Е. Е., Якуш С. Е. Моделирование распространения лесных пожаров на основе модифицированной двумерной модели // Матем. моделирование. 2016. Т. 28, вып. 12. С. 20—32; Kuleshov А. А., Myshetskaya E. E., Yakush S. E. Numerical simulation of forest fire propagation based on modified two-dimensional model // Mathematical Models and Computer Simulations. 2017. July. Vol. 9, no. 4. P. 437—447.

и фокусировки ударных волн в химически реагирующей газовой смеси с помощью специального разработанного программного комплекса.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- 1. Разработать трехмерную математическую модель нестационарного горения многокомпонентной газовой смеси, учитывающую возможность возникновения дефлаграции и детонации, а также перехода между этими режимами.
- 2. Разработать численную модель рассматриваемой системы с учетом ее работы на гибридных вычислительных системах.
- 3. Провести тестирование разработанных математической и численной моделей.
- 4. Исследовать с помощью разработанного комплекса процессы, протекающие при отражении и фокусировке ударных волн в трубе, заполненной химически реагирующей смесью газов.
- 5. На основании результатов исследований провести валидацию разработанного программного комплекса.

## Научная новизна:

- 1. Впервые создана трехмерная вычислительная модель, позволяющая описать переходные процессы в химически реагирующей газовой смеси: переход горения в детонацию. В отличие от существующих моделей детонации в данной учитывается турбулентный перенос и подсеточная турбулентность, что и позволяет проводить моделирование переходных процессов.
- 2. Впервые созданы коды для решения трехмерных задач физикохимической газовой динамики на универсальных процессорах и на графических ускорителях.
- 3. Впервые была осуществлена валидация трехмерного вычислительного комплекса физико-химической динамики вязкого газа путем сравнения результатов расчетов с экспериментами по отражению ударных волн в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина и конуса.
- Было выполнено оригинальное исследование перехода горения в детонацию при отражении ударной волны от внутренней поверхности клина.
- 5. Показано, что при отражении ударной волны в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина или конуса возможны три различных сценария развития процесса: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при падающей волне промежуточной интенсивности за отражение ударной волной

возможно возникновение волны горения, которая после воспламенения в вершине клина отстает от отраженной волны, затем ускоряется в результате турбулизации и приводит к возникновению детонации (взрыва во взрыве).

**Практическая значимость**. Исследование процессов горения и детонации газовых смесей, возникающих в результате отражения и фокусировки ударных волн в химически реагирующей газовой смеси, имеет различное применение во многих отраслях деятельности. Результаты исследований могут существенно упростить и ускорить некоторые стадии разработки новых устройств, основанных на горении и детонации. Это относится как к существующим двигателям и их оптимизации, так и к разработке перспективных детонационных двигательных систем. С другой стороны, данные исследования могут также спрогнозировать и предотвратить некоторые негативные последствия горения и детонации, связанные с безопасностью жизнедеятельности и возникающие при работе с различными видами горючих веществ. Наличие программного пакета, позволяющего достаточно точно и быстро проводить моделирование такого рода процессов, позволяет проводить решение многих задач, связанных с горением и детонацией газовых смесей, в том числе и в перечисленных выше областях.

Методология и методы исследования. Методом исследований являлось вычислительное моделирование на основе механики сплошных сред с учетом физических и химических превращений, а также с учетом подсеточных моделей турбулентности. В качестве вычислительных схем были рассмотрены несколько явных схем сквозного счета 2-го/3-го порядка точности по пространству и времени. Схемы реализованы на регулярной сетке из одинаковых элементов (прямоугольных параллелепипедов) и произвольной, в общем случае, топологии. В качестве языков программирования были рассмотрены языки Фортран и С. Параллельность исполнения осуществлялась с помощью технологий OpenMP и CUDA.

Используемая математическая модель основана на системе уравнений трехмерной нестационарной многокомпонентной газовой динамики с химическими реакциями, с учетом эффектов переноса и турбулентности и представляет собой систему уравнений типа Навье—Стокса, осредненных по Рейнольдсу. Использована модель турбулентности  $k - \omega$ . Граничные условия на стенах соответствуют условию непротекания. Для вязкого турбулентного течения используется дополнительное граничное условие, определяющее напряжение сдвига на стенке по данным модели турбулентности. Использован кинетический механизм сжигания водорода, включающий 20 реакций.

Исследование проводилось поэтапно. На первом этапе проведена разработка вычислительной модели для описания переходных процессов, основанные на полной системе уравнений динамики многокомпонентных

сред с учетом физических и химических превращений, а также с учетом подсеточных моделей турбулентности.

Вторым этапом было проведение тестирования разработанного вычислительного комплекса путем сравнения результатов расчетов модельных задач с точными решениями задач о распаде произвольного разрыва в реагирующем газе, а также путем сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными по распространению волн в сложных геометрических конфигурациях. Проведение на основании сравнений данных уточнения моделей химических взаимодействий и турбулентности.

На третьем этапе проведена разработка параллельной версии вычислительного комплекса, позволяющая использовать системы с общей памятью и графические процессоры.

На заключительном этапе проведено исследование процессов, протекающих при отражении и фокусировке ударных волн в ударной трубе, заполненной водородо-воздушной смесью.

Принципиальной новизной подходов и методов была разработка и корректировка вычислительных моделей, исходя из сравнения результатов с экспериментальным базисом неравновесных переходных процессов.

#### Основные положения, выносимые на защиту:

- 1. Разработана вычислительная модель нестационарного горения многокомпонентной газовой смеси в трехмерной постановке, учитывающая возможность возникновения дефлаграции и детонации, а также переходных режимов и ее параллельная реализация.
- 2. Получены результаты оригинального численного исследования процессов отражения и фокусировки ударных волн в клиновидной и конусообразной вставках в химически реагирующей газовой смеси в трехмерной постановке.
- 3. Получены различные сценарии развития процессов при отражении ударной волны в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина или конуса: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при падающей волне промежуточной интенсивности в результате воспламенения смеси в вершине возникает волна горения, которая отстает от отраженной волны, затем ускоряется в результате турбулизации и приводит к возникновению детонации (взрыва во взрыве).
- 4. Созданы верификационный и валидационный базисы для решения задач горения и детонации.
- 5. Проведена настройка вычислительной модели для водородно-воздушных смесей путем проведения различных вычислительных и физических экспериментов.

Достоверность Основу используемых при построении программного комплекса физических моделей и математических алгоритмов составляют общепринятые в научной среде фундаментальные законы. Созданные программные реализации были протестированы на ряде специализированных тестовых задач. Используемые численные методы показали хорошую сходимость к аналитическим решениям. Полученные результаты хорошо согласуются с теоретическими и экспериментальными данными по горению и детонации водородо-воздушных смесей газов.

**Апробация работы.** Результаты работы докладывались на российских и международных конференциях:

- 1. VI Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации (г. Минск, Беларусь, 11-14 ноября 2019).
- XX Всероссийская конференция молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям (г. Новосибирск, Россия, 28 октября - 1 ноября 2019).
- Научная конференция «Ломоносовские чтения— 2017» (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия, 17-26 апреля 2017).
- 4. XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование» (г. Саров, Россия, 3-7 октября 2016).
- 5. Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л. Чебышева и приуроченная к 20-летию сотрудничества ОАО «Сургутнефтегаз» и компании SAP (СурГУ, г. Сургут, Россия, 17-18 мая 2016).
- 6. Научная конференция «Ломоносовские чтения— 2016» (МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия, 18-27 апреля 2016).
- 7. IV Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации (г. Минск, Беларусь, 9-12 ноября 2015).
- 8. Международная конференция «Суперкомпьютерные дни в России 2015» (г. Москва, Россия, 28-29 сентября 2015).
- 9. XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (г. Казань, Россия, 20-24 августа 2015).
- 10. Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л.Чебышёва и приуроченная к 20-летию сотрудничества ОАО «Сургутнефтегаз» и компании SAP (СурГУ, г. Сургут, Россия, 14-16 мая 2014).
- 11. Международная суперкомпьютерная конференция «Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров» (г. Новороссийск (пос. Абрау-Дюрсо), Россия, 22-27 сентября 2014).

**Личный вклад.** Все исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично автором в процессе научной деятельности. Материалы из совместных публикаций, использованные в

работе, по большей части состоят из оригинальных результатов автора. Основные результаты диссертации получены впервые и лично автором. В совместных работах научному руководителю д.ф.-м.н. Н. Н. Смирнову принадлежит выбор темы исследований, первоначальная постановка задач и интерпретация полученных результатов [1; 5-11], научному консультанту д.ф.-м.н. Б. П. Рыбакину принадлежит постановка, метод решения и результаты моделирования по задаче о взаимодействии сильной ударной волны со сферой газа пониженной плотности [2; 12]. В работах [1; 5-9; 3; 4] представлена реализованная автором вычислительная модель и результаты проведенных автором исследований по изучению процессов распространения детонации в трубе цилиндрического сечения [1], фокусировки ударных волн в клиновидной [5; 6; 4] и конусообразной [8; 9; 3] вставках в химически реагирующей газовой смеси в трехмерной постановке. В работах [10-12] представлены результаты тестирований используемых в данной работе численных схем, проведенные автором. В работах [1; 9; 2; 12] описаны результаты работы созданного автором программного комплекса на многоядерных системах и графических процессорах при проведении расчетов задач с физико-химическими превращениями. В программных пакетах, на которые получены свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ [39; 40], автором написан весь код на языке Фортран, реализованы численные схемы JT, KT, KL и все сопутствующие алгоритмы, в том числе расчет химической кинетики и параллельные блоки, использующие технологии OpenMP и CUDA.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 40 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных BAK, 8— в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus (из них 7 работ в журналах из квартиля Q1), 24— в тезисах докладов, на основании созданных программных кодов получено 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

#### Содержание работы

Во **введении** представлена актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, сформулирована цель, перечислены поставленные в данной работе задачи, изложена научная новизна и практическая значимость, кратко описаны методы исследований, перечислены основные положения, выносимые на защиту, обоснована достоверность представляемой работы, перечислены мероприятия, на которых докладывались результаты, указан личный вклад автора.

**Первая глава** посвящена краткому обзору истории исследования процессов горения и детонации газовых смесей, переходов между этими

режимами, турбулентности и рассмотрено современное состояние и современные способы математического моделирования данных процессов для газовых смесей.

Вторая глава посвящена описанию математической и вычислительной моделей, используемых в работе для описания процессов, протекающих в многокомпонентной смеси химически реагирующих совершенных газов.

В разделе 2.1 представлена математическая модель, используемая для описания макрокинетики детонации, горения и переходных процессов. Она включает в себя законы сохранения, модель турбулентности, модель химической кинетики, моделирование вязкости, теплофизических параметров смеси, граничные и начальные условия и основана на трехмерных уравнениях Навье-Стокса. В §2.1.1 представлены основные уравнения, соответствующие уравнениям баланса массы компонентов, импульса и энергии. В §2.1.2 представлено описание используемой двухпараметрической  $k-\omega$  модели турбулентности Уилкокса. В §2.1.3 приведено описание термодинамики смеси, которая рассчитывалась на основании двух температурных интервалов и аппроксимационных полиномов четвертого порядка. Формат работы с коэффициентами этих полиномов соотвествует формату из базы CHEMKIN-II. Также был рассмотрен вариант с одним температурным интервалом и полиномом третьего порядка, коэффициенты которого были получены на основе регрессивного анализа с помощью метода минимальных квадратов из коэффициентов для двух температурных интервалов. В §2.1.4 рассмотрены используемые кинетический механизм и кинетическая модель сжигания водорода. Данный механизм включает в себя 20 реакций и 9 компонентов (азот выступает в роли нейтральной компоненты). Он основан на механизме Мааса—Варнаца, в котором часть реакций были заменены из более современных механизмов Хегеш и Хонга, и включает в себя обратимые и необратимые элементарные реакции двух типов: обменные реакции первого рода и реакции рекомбинации второго рода. Коэффициенты прямой реакции аппроксимировались расширенной формулой Аррениуса. Коэффициенты обратной реакции рассчитывались через константу равновесия так, чтобы динамика кинетического механизма без учета влияния посторонних потоков, и с учетом постоянства плотности и внутренней энергии, приводила к состоянию химического равновесия. В §2.1.5 представлен используемый способ расчета молекулярной вязкости. В §2.1.6 описаны используемые граничные условия на стенах, которые соответствуют условию непротекания. Для вязкого турбулентного течения используется дополнительное граничное условие, определяющее напряжение сдвига на стенке по данным модели турбулентности. В §2.1.7 представлено описание способа задания начальных условий. Для решения рассматриваемая система уравнений была разбита на газодинамическую часть, содержащую конвективные и диффузионные члены, и химическую часть.

В разделе 2.2 представлена используемая вычислительная модель. Она основана на использовании центральных схем второго/третьего порядка точности. В §2.2.1 подробно рассмотрено построение одной из используемых численных схем: схемы третьего порядка точности по пространству Курганова-Леви для рассматриваемой системы уравнений на равномерной параллелепипедальной сетке. Также представлена временная дискретизация второго и третьего порядка точности с помощью специального метода Рунге-Кутты. В §2.2.2 представлено описание способа расчета жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики. Решение осуществляется с помощью четырех стадийного метода типа Розенброка 4-го порядка точности с однократным вычислением якобиана. Также представлено формирование данной системы уравнений и подробная реализация метода для нее с учетом возможных источниковых членов, закона сохранения массы элементов, позволяющий сократить число дифференциальных уравнений. Подробно описан алгоритм формирования якобиана системы на основании аналитических выражений, включающий в себя расчет частных производных скорости образования компонентов, частных производных от интенсивности реакции, производных от прямых и обратных реакции, частных производных от внутренней энергии. Подробно описан алгоритм для шага по времени на этапе расчета кинетических уравнений. В §2.2.3 приведено описание контроля шага по времени при расчетах с помощью критерия устойчивости Куранта-Фридрихса-Леви.

В **третьей главе** представлены результаты работы разработанного программного комплекса на ряде тестовых задач.

В разделе 3.1 рассмотрено решение задачи Римана о распаде произвольного разрыва с десятью различными наборами начальных условий, соответствующие различным волновым конфигурациям. Сравнение с аналитическим решением производилось для трех численных схем: Цзяня и Тедмора (JT), Курганова и Тедмора (КТ) и Курганова и Леви (КL). Было получено, что в большинстве тестовых задач лучше всего себя показал метод KL, хотя в некоторых случаях использование метода JT может дать лучшее совпадение с аналитическим решением. В принципе, все три расчетных схемы показали адекватное поведение на рассмотренных задачах. Например, при рассмотрении условий, соответствующих тесту, известному в литературе как модификация теста Сода (Рис. 1), было получено, что несмотря на одинаково близкое описание решения задачи всеми схемами, методы KT и KL несколько лучше описывают значения параметров в промежутках между волнами. В схеме ЈТ довольно ярко выражена аппроксимация разрывов гладкими функциями, что особенно хорошо прослеживается на графике энергии на контактном разрыве.

В разделе 3.2 приведены результаты моделирования прямого инициирования и распространении волны детонации в трубе с квадратным



Рис. 1. Результаты расчета для модифицированного теста Сода. Плотность (левый верхний график), давление (правый верхний график), скорость (левый нижний график) и энергия (правый нижний график). сечением, заполненной стехиометрической смесью водорода, кислорода и азота. При моделировании были рассмотрены сетки размером  $260 \times 26 \times 26$ ,  $500 \times 50 \times 50$ ,  $900 \times 90 \times 90$ ,  $1000 \times 100 \times 100$  и  $2000 \times 200 \times 200$  элементов (1.92 мм, 1.0 мм, 0.556 мм, 0.5 мм и 0.25 мм соответственно). В разделе представлены результаты эволюций параметров среды и их сравнение для используемых сеток. К примеру, на Рис. 2 приведено распределение давления по центру расчетной области в плоскости *Оху* в момент времени t =50 мкс для некоторых из рассмотренных сеток.

Получено, что на самой грубой сетке местоположение детонационной волны сильно размыто и немного смещено вправо. Данное смещение не связано с увеличением скорости волны, а происходит скорее из-за увеличенной задержки начального инициирования детонации на более грубых сетках из-за численного размывания (диффузии) таких критических для условий инициирования детонации параметров, как температура и концентрации радикалов. Сдвиг на несколько расчетных ячеек в следствие большей скорости волны соответствовал бы существенно большему значению этой скорости, чего на дальнейших графиках ее оценки не наблюдается. По мере увеличения разрешимости сетки местоположение волны практически не изменяется, однако, фронт становится менее размытым и более плоским, давление на фронте увеличивается.

Проведенные оценки скорости распространения детонационной волны и уровня давления за фронтом (Рис. 3) показывают, что для всех рассмотренных сеток скорость волны постепенно возрастает, выходя на значение, немного превышающее теоретическую скорость волны Чепмена—Жуге для данного случая ( $v_{CH} = 1957 \text{ м/c}$ ). При этом превышение не превосходит 1%. Отличие в скорости при использовании различных сеток



Рис. 2. Распределение давления по центру расчетной области в плоскости *Оху* в момент времени t = 50 мкс для сеток  $260 \times 26 \times 26$ ,  $500 \times 50 \times 50$ ,  $1000 \times 100 \times 100$  и  $2000 \times 200 \times 200$  (сверху-вниз).

находится в пределах нескольких долей процента, постепенной уменьшаясь при уменьшении размера расчетной ячейки.

В целом было получено, что скорость волны существенно зависит от размера сетки только на начальном этапе, что связано с численным определением фронта волны детонации и аппроксимации скорости. Пик давления для всех численных сеток на начальном этапе увеличивается, затем он стабилизируется. Для всех сеток величина пика превосходит теоретическое значение давления в волне Чепмена—Жуге. Таким образом, можно отметить, что слабая детонация вследствие опережающего ударную волну поджигания горючей смеси численной диффузией энергии или концентрации радикалов, не возникает даже на самой грубой сетке. С уменьшением пространственного шага сетки величина пика растет каждый раз примерно на 2 бара (при уменьшении шага в 2 раза). В то же время, полученный численно пик на этих сетках еще примерно на 6 бар ниже теоретического значения в пике Неймана. Эта оценка говорит о том, что достижения близкого к пику Неймана значения при использовании этой сетки следует



Рис. 3. Динамика скорости волны детонации (слева) и значения пика давления (справа) для различных расчетных сеток. Пурпурным цветом отмечена скорость и давление детонации Чепмена—Жуге, черным давление в пике Неймана.

ожидать при дальнейшем уменьшении шага сетки не менее, чем на порядок. В то же время для получения необходимой скорости детонации достаточно и самой грубой из рассмотренных сеток с размером элементов в 1.92 мм.

В разделе 3.3 представлен анализ параллельной составляющей реализованных программ. Изначально планировалась адаптировать разрабатываемый программный комплекс под вычислительные узлы с общей памятью, укомплектованные специализированными сопроцессорами. В связи с этим для распараллеливания были рассмотрены технология для систем с общей памятью OpenMP и технология CUDA для программирования графических сопроцессоров фирмы NVIDIA. Тестирование параллельного режима работы проводилось на ряде двумерных и трехмерных задач, как с учетом химических превращений, так и без их учета.

Результаты ускорения решения газодинамических задачах без учета химических реакций в двумерной постановке на графическом сопроцессоре NVidia Tesla M2090 представлены на Рис. 4 (левый график). Сравнение осуществлялось с последовательным кодом, расчет которого производился на одном ядре процессора Intel Xeon X5650. По оси абсцисс указано количество ячеек по одному пространственному измерению N. Суммарное число ячеек, используемое в расчетах, есть  $N^2$ . Было получено, что на самой грубой сетке из-за малого количества ячеек и, как следствие, слабой загрузки графической карты, скорость работы последней сопоставима с скоростью центрального процессора. С увеличением размера расчетной сетки и объема обрабатываемой информации наблюдается существенных рост относительной скорости расчета. На самой мелкой из рассмотренных сеток было получено более чем 40 кратное ускорение.



Рис. 4. Графики ускорения расчетов, полученные на графическом сопроцессоре по сравнению с последовательным кодом без учета химических реакций (левый график) и с их учетом (правый график), в зависимости от размера разностной сетки.

При анализе ускорения решения задачи прямого инициирования детонации в двумерной расчетной области, заполненной химически реагирующей водородно-воздушной газовой смесью, рассмотренной в разделе 3.2 (Рис. 4, правый график), было получено, что несмотря на большее ускорение для грубых сеток (64, 128 ячеек по каждому пространственному измерению) по сравнению с чистой газодинамикой, с дальнейшим ростом объемов обработки происходит «насыщение», кривая ускорения выходит на некоторое постоянное значение. При этом объем данных, необходимых для хранения в памяти графического процессора возрастает. В связи с этим, при использовании алгоритма, который хранит все данные в памяти сопроцессора и не производит постоянные обмены с оперативной памятью центрального процессора, накладываются более жесткие ограничения на размеры используемых сеток. При использовании более современной карты NVidia Tesla K20 с большим количеством элементарных ядер (и другой архитектурой), но, приблизительно, одинаковым энергопотреблением, был получен 1.5 кратный прирост ускорения без каких-либо дополнительных существенных изменений.

При рассмотрении работы программы на системе с несколькими однотипными графическими картами (Рис. 5) на сетках до 1024<sup>2</sup> ячеек было получено поведение, близкое к работе на одной карте с практически линейным ростом относительного ускорения. Однако, на самой большой из рассмотренных сеток в 2048<sup>2</sup> ячеек наблюдается «заваливание», т.е. относительное время работы увеличивается.

При рассмотрении ускорения на двух и четырех картах относительно одной карты (Рис. 5, правый график) было получено, что максимумы на графиках достигаются при использовании сетки в 1024<sup>2</sup> ячеек и соответствуют практически линейному росту с увеличением числа карт. На





Рис. 5. Графики ускорения расчетов, полученные на графических сопроцессорах по сравнению с последовательным кодом (левый график) и с относительно одной графической карты (правый график), в

зависимости от размера разностной сетки.

большей сетке наблюдается падение относительной скорости работы, связанное, скорее всего, с увеличением объема данных, передаваемых между сопроцессорами.

При рассмотрении трехмерных задач с большим количество расчетных ячеек в связи с возросшим объемом необходимой памяти было проведено изменение алгоритма передачи-расчета при работе с графическим процессором. Полученные данные по времени работы программы в зависимости от размера разностной сетки на 10 мкс для задачи из Раздела 3.2 представлены на Рис. 6. В качестве сопроцессора в данном случае использовалась специализированная графическая карта NVidia Tesla k40, обладающая 12 Гб общей памяти. Соответствующие значения времени расчета и размеров сеток представлены в Таблице 1. При этом для сеток, у которых размер ячеек был больше 0.05 мм (1000 × 100 × 100 ячеек и меньше), все данные полностью помещались в память графического сопроцессора. Для более мелких сеток был использован алгоритм, при котором в асинхронном режиме производились следующие операции: запуск вычислительного ядра, копирование данных на сопроцессор и обратное копирование обработанных данных в память центрального процессора.

N⁰	Размер сетки	Время расчета, сек
1	$260\times26\times26$	14.14
2	$500 \times 50 \times 50$	173.51
3	$900 \times 90 \times 90$	1906.11
4	$1000 \times 100 \times 100$	2984.13
5	$2000 \times 200 \times 200$	42002.20

Таблица 1. Время исполнения на графическом процессоре NVidia Tesla K40 при использовании различных разносных сеток.

Было получено (Рис. 6), что существенной «просадки» времени счета, связанной с переходом на другой алгоритм, на мелких сетках не наблюдается. Из этого можно сделать вывод, что время, затрачиваемое на обработку данных на сопроцессоре, полностью перекрывает время, затрачиваемое на постоянный обмен данными между оперативной памятью центрального процессора и глобальной памятью сопроцессора.

На Рис. 7-8 представлены данные по времени выполнения и ускорению, полученные на той же задаче из Раздела 3.2, для аналогичных моментов времени и сетки  $500 \times 50 \times 50$  элементов при рассмотрении работы алгоритма, ориентированного на системы с общей памятью. Его построение осуществлялось с помощью технологии ОрепМР. Расчеты производились на системе АПК-1 (Аппаратно-Программный Комплекс), узел которой снабжен четырьмя



Рис. 6. График времени расчета в зависимости от размера разностной сетки в логарифмическом масштабе.

двенадцати ядерными процессорами AMD Opteron.



Рис. 7. Графики времени (левый, логарифмический масштаб) и ускорения (правый) расчетов, полученные на многопроцессорной системе АПК-1, в зависимости от количества используемых потоков.

Было получено (Рис. 7, левый), что с ростом числа используемых потоков на многоядерной системе время исполнения задачи в большинстве случаев уменьшается. Исключения составляют только случай использования одного потока в параллельной реализации, время исполнения которого больше, чем последовательный код, что естественно, поскольку в серийном коде не тратится компьютерное время и прочие ресурсы на создание и обеспечение работы параллельных процессов, и варианты с числом потоков больше 40, в которых наблюдается немонотонный характер этой зависимости. Причиной немонотонности в данных случаях может служить как характер пересылок, так и вмешательство конкурирующих системных процессов, замедляющих расчет при дефиците свободных ядер.

При рассмотрении ускорения A при решении задачи в зависимости от количества использующихся потоков (ядер) n по сравнению с последовательным кодом (Рис. 7, правый) было получено, что ускорение вплоть до 33 потоков растет практически линейно (несколько проседая для 1 потока), затем линейность нарушается, восстанавливаясь для 36 и 38 потоков и подходя к линейному снова при 43 и 47 потоках. Последние близкие линейные значения не очень надежны в виду сделанных выше предположений о причинах просадки производительности. Впрочем, эффективность (или загрузка процессоров) меньше 1, поскольку наклон прямого участка ускорения меньше единицы.

При рассмотрении коэффициента эффективности ускорения или коэффициента загрузки процессоров E в зависимости от количества потоков n согласно соотношению:

$$E(n) = A(n)/n, \quad E(0) = 1,$$

было получено (Рис. 8), что эффективность на первых 6 ядрах быстро падает от 1 до 0.8, затем медленно снижается примерно до 0.73 и держится на данном уровне до 33 потоков, практически стабилизируясь. Затем поведение этой характеристики становится неустойчивым, начинаются колебания в пределах от 0.6 до 0.7. В целом, после использования 33 ядер эффективность в среднем уменьшается, но все же остается около 0.65 при максимальном числе потоков 48.



Рис. 8. График эффективности ускорения в зависимости от количества используемых потоков.

#### В четвертой главе

представлены результаты MOделирования лля залачи 0 инициировании детонации в цилиндрической трубе при фокусировке падающей ударной волны на специальную вставку для нескольких случаев, соответствующим: возникновению детонации в клинообразной вставке, возникновению детонации в конусообразной вставке, отражению ударной волны от внутренней поверхности вставки в виде клина и переходу горения в детонацию при отражении от

внутренней поверхности клина. В данной задаче труба была заполнена покоящейся стехиометрической водородно-воздушной смесью, при этом

рассматривалась ударная волна различной интенсивности, набегающая на соответствующую вставку. Все рассмотренные начальные параметры соответствуют данным физических экспериментов, проведенных в институте тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, с которыми и проводилось сравнение. Схема рассматриваемой задачи в сечении, проведенном через ось трубы, представлена на Рис. 9. Геометрия расчетной области полностью соответствуют геометрии измерительной секции ударной трубы, в которой проводились эксперименты. Сравнение с экспериментальными данными производилось по показаниям расположенных вдоль трубы датчиков давления, а также по оценкам скорости распространения возникающих в системе фронтов пламени. При этом было рассмотрено два варианта численного счета: с использованием турбулентной модели (численная схема №1) и без турбулентности (численная схема №2).

В разделе 4.1 И раз-4.2были представлены деле близких результаты для двух случаев: детонации в клине и в конусе соотвественно. Приведена эволюция распределения газодинамических параметров среды в двух перпендикулярных плоско-



Рис. 9. Схема рассматриваемой задачи.

стях, проведенных через центральную ось трубы. Было получено, что в ходе фокусировки в данных случаях интенсивности падающей ударной волны было достаточно для инициирования детонации в центре как конусообразной вставки, так и клинообразной. При этом для конуса потребовалась волна меньшей интенсивности, чем для клина. После возникновения детонационная волна в обоих случаях начинает распространяться навстречу набегающему потоку.

Было получено, что в данных случаях обе численные схемы дают результат достаточно близкий по своему поведению к экспериментальным данным. В случае отсутствия моделирования турбулентности детонационная волна начинает замедляться и подходит к следующим датчикам с небольшим запозданием по сравнению с экспериментом и с численной моделью, учитывающей турбулентность (Рис. 10), выходя на теоретическую скорость детонации Чепмена—Жуге. Экспериментальные данные на рисунке представлены красным цветом, численная схема с учетом эффектов турбулентности изображена синим цветом, а численная схема без учета турбулентности — черным цветом.

При этом в эксперименте и схеме №1 скорость волны немного выше теоретической. Это можно объяснить тем, что данная скорость направлена в сторону, противоположную движению потока, а из-за наличия вязких сил, как в эксперименте, так и в численной модели, поток вблизи стенок



Рис. 10. Скорость распространения волны около датчиков и теоретическая скорость детонации Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая). Случай детонации в клине (слева) и в конусе (справа).

замедляется, что способствует увеличению скорости детонационной волны и обгону волной ее центральной части. Таким образом, определенная средняя скорость детонации может быть выше, чем теоретическое значение скорости детонации Чепмена—Жуге.



Рис. 11. Скорость распространения волны около датчиков для случая отражения ударной волны.

В разделе 4.3 представлены результаты для случая клинообразной вставки, в котором интенсивности падающей ударной волны было не достаточно для детонирования горючей газовой смеси. В результате было получено отражение, фокусировка и дальнейшее распространение в трубе обычных ударных волн. На Рис. 11 приведена оценка скорости распространения отраженной ударной волны. Из графиков видно, что обе численные схемы, как с учетом тур-

булентности (синий цвет), так и без (черный цвет), дают довольно близкие к эксперименту (красный цвет) результаты. Однако, как и в предыдущих случаях, скорость распространения волны в случае моделирования турбулентности после установления немного выше и ближе к данным эксперимента, хотя на первых этапах после отражения результаты без учета турбулентности не уступают турбулентному варианту.

В разделе 4.4 представлены результаты для случая, в котором при отражении и фокусировке ударной волны в клинообразной вставке произошло воспламенение горючей смеси, однако, детонация не возникла. Было получено, что при дальнейшем распространении фронта пламени дефлаграционного горения вслед за отраженной ударной волной в определенный момент времени на фронте пламени смесь детонирует. Это четко отражено на графиках эволюции температуры (Рис. 12—13), на которых отслеживается фронт отраженной волны, момент воспламенения смеси (t = 80 мкс) и граница зоны горения.

Было получено, что после воспламенения происходит неустойчивое распространение фронта горения вслед за отраженной ударной волной t = 160 - 240 мкс. Образуются ярко выраженные складки пламени с приоритетным распространением по центру области t = 240 - 440 мкс. После t = 400 мкс скорость волны горения быстро увеличивается, причем складки несгоревшего газа возникают весьма глубокие. В окрестности стенок образуется несгоревшие зоны, которые постепенно догорают.

В момент времени t = 440 мкс носик области горения быстро вытягивается, а в момент времени t = 450 мкс видно существенное повышение температуры на фронте пламени (около T = 2700 K) и начало детонации. В момент времени t = 470 мкс волна начинает отражаться от боковой стенки. Получены детонационная волна, распространяющаяся к открытому концу трубы, и волна ретонации, двигающаяся в обратном направлении к вставке по несгоревшему газу в окрестности стенки и дожигающая горючую смесь. Другая часть волны, распространяющаяся ближе к центральной оси, является ударной волной в сгоревшем газе. В дальнейшем детонационная волна догоняет впереди идущую ударную (t = 505 мкс), а ударная волна в сгоревшем газе, хорошо заметная по адиабатическому подъему температуры в волне, доходит до вставки (t = 525 мкс). Также видна периодическая фокусировка волн сжатия у оси системы в результате отражений волн от боковых стенок.

При сравнении с экспериментальными данными (Рис. 14 — 16) для данного случая было получено, что в численном счете наблюдается некоторая задержка при подходе отраженной ударной волны к 5-му датчику по сравнению с экспериментом. Однако, время подхода к 4-му у них уже практически идентично. В дальнейшем как в эксперименте, так и в численном счете, детонация возникаем между 3-м и четвертым датчиками, причем в численном счете переход происходит несколько раньше. Несмотря на это, время подхода детонационной волны к 3-му датчику в эксперименте немного меньше. Дальнейшее распространение детонационной волны в численном счете и эксперименте практически совпадают.

Детонация в численном счете возникла практически напротив 4-го датчика, в тоже время в эксперименте переход произошел на четверти пути к 3-му датчику. Сама качественная структура множественных взаимодействий отраженных волн довольно близка, несмотря на свою сложность. Дальнейшее рассмотрение *x-t* диаграмм подтверждает то, что после того, как детонационная волна догоняет ударную, в обоих вариантах подход к 3-му датчику происходит практически в одно и тоже время.



Рис. 12. Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости *Oxy* (слева) и *Oxz* плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.



Рис. 13. Распределение температуры по центру расчетной области в плоскости *Oxy* (слева) и *Oxz* плоскости (справа) для некоторых моментов времени при фокусировке ударной волны в клине и последующем переходе горения в детонацию.



Рис. 14. Давление в контрольных точках в зависимости от времени: экспериментальные данные (красная линия), численная схема 1 (синяя линия).



Рис. 15. Скорость распространения волны около датчиков для переходного случая.

График скорости (Рис. 15) показывает, что расчетная скорость (синий цвет) распространения отраженной ударной волны, а также возникшей позже детонационной волны, близка к экспериментальной (красный цвет). Скорость детонации также немного превосходит теоретическую скорость Чепмена—Жуге (бирюзовая прямая).

Подход возникшей волны ретонации, а в дальнейшем ударной

волны, к датчикам 4-6 по времени довольно сильно отличается в численном счете от эксперимента. Это связано с тем, что детонация в 1-м случае возникла немного раньше и, если рассмотреть *x-t* диаграммы положения фронтов головных волн (Рис. 16), немного ближе к вставке.

В <u>заключении</u> приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. В данной работе создана трехмерная вычислительная модель, позволяющая описать переходные процессы в химически реагирующей газовой смеси: переход горения в детонацию.



Рис. 16. Положение фронта ударной и детонационной волн (синие кривые) для случая перехода горения в детонацию и давление в контрольных точках (красные кривые) для результатов численного моделирования (слева) и физического эксперимента (справа).

- 2. Созданы коды для решения трехмерных задач физико-химической газовой динамики на универсальных процессорах и на графических ускорителях.
- 3. Было проведено оригинальное исследование перехода горения в детонацию при отражении ударной волны от внутренней поверхности клина. Показано, что за отраженной ударной волной возможно возникновение волны горения, которая после воспламенения в вершине клина отстает от отраженной волны, затем ускоряется в результате турбулизации и приводит к возникновению детонации (взрыва во взрыве).
- 4. Показано, что при отражении ударной волны в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина или конуса возможны различные сценарии развития процесса: при слабой падающей волне отражение и фокусировка не приводят к зажиганию горючей смеси, при сильной падающей волне ее отражение и фокусировка приводят к возникновению детонационной волны в вершине, а при обладании падающей волной промежуточной интенсивности в результате воспламенения смеси в вершине возникает волна горения, которая затем ускоряется и приводит к переходу горения в детонацию.
- 5. Была осуществлена валидация трехмерного вычислительного комплекса физико-химической динамики вязкого газа путем сравнения результатов расчетов с экспериментами по отражению ударных волн в химически реагирующем газе от внутренней поверхности клина и конуса.

## Публикации автора по теме диссертации

#### В изданиях из списка ВАК РФ

- 1. Бетелин В. Б., Никитин В. Ф., Смирнов Н. Н., Смирнова М. Н., Стамов Л. И., Тюренкова В. В. Решение задач горения и физико-химических превращений на графических процессорах // Математическое моделирование. — 2017. — Т. 29, № 4. — С. 3—20.
- 2. Рыбакин Б. П., Егорова Е. В., Стамов Л. И. Применение графических процессоров для решения задач газовой динамики с учетом уравнений химической кинетики // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии. 2013. Т. 14. С. 31—37.
- 3. Стамов Л. И., Тюренкова В. В. Математическое моделирование отражения и фокусировки ударных волн в конической полости в химически реагирующем газе // Математическое моделирование. 2018. Т. 30, № 3. С. 3—18.
- 4. Стамов Л. И. Вычислительное моделирование отражения и фокусировки ударных волн в клинообразной полости в химически реагирующем газе // Вестник кибернетики. — Сургут, 2018. — Т. 32, № 4. — С. 85—94.

# В изданиях, входящих в международные базы цитирования Web of Science или Scopus

- Smirnov N. N., Penyazkov O. G., Sevrouk K. L., Nikitin V. F., Stamov L. I., Tyurenkova V. V. Onset of detonation in hydrogen-air mixtures due to shock wave reflection inside a combustion chamber // Acta Astronautica. — 2018. — Vol. 149. — P. 77—92.
- Smirnov N. N., Penyazkov O. G., Sevrouk K. L., Nikitin V. F., Stamov L. I., Tyurenkova V. V. Nonequilibrium processes in meta-stable media // The European Physical Journal E. — 2018. — Vol. 41:66.
- Tyurenkova V. V., Stamov L. I. Flame propagation in weightlessness above the burning surface of material // Acta Astronautica. — 2019. — Vol. 159. — P. 342—348.
- Smirnov N. N., Penyazkov O. G., Sevrouk K. L., Nikitin V. F., Stamov L. I., Tyurenkova V. V. Detonation onset following shock wave focusing // Acta Astronautica. — 2017. — Vol. 135. — P. 114—130.
- Smirnov N. N., Nikitin V. F., Stamov L. I., Nerchenko V. A., Tyrenkova V. V. Numerical Simulations of Gaseous Detonation Propagation Using Different Supercomputing Architechtures // International Journal of Computational Methods. — 2017. — Vol. 14, no. 4. — P. 1750038-1—1750038-41.
- Smirnov N. N., Betelin V. B., Nikitin V. F., Stamov L. I., Altoukhov D. I. Accumulation of errors in numerical simulations of chemically reacting gas dynamics // Acta Astronautica. — 2015. — Vol. 117. — P. 338—355.
- Smirnov N. N., Nikitin V. F., Stamov L. I., Altoukhov D. I. Supercomputing simulations of detonation of hydrogen-air mixtures // International Journal of Hydrogen Energy. — 2015. — Vol. 40, no. 34. — P. 11059—11074.

 Rybakin B. P., Stamov L. I., Egorova E. V. Accelerated Solution of Problems of Combustion Gas Dynamics on GPUs // Computers and Fluids. — 2014. — Vol. 90. — P. 164—171.

## В сборниках трудов конференций

- 13. Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Стамов Л. И. Вычислительное моделирование возникновения детонации в водородно-воздушной смеси при фокусировке ударных волн // Сборник докладов. VI Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации, 11-14 ноября 2019 г. Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси, г. Минск, 2019. С. 143—149.
- 14. Стамов Л. И. Численное моделирование инициирования детонации при фокусировке ударных волн // Тезисы XX Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. г. Новосибирск, Россия, 28 октября - 1 ноября 2019 г. — ИВТ СО РАН, г. Новосибирск, 2019. — С. 44—45.
- 15. Михальченко Е. В., Стамов Л. И., Рыбакин Б. П. Решение задач инициирования детонации при отражении ударной волны от клина // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. Секция механики. 17-26 апреля 2017 г., Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова. 2017. С. 148—148.
- 16. Нерченко В. А., Никитин В. Ф., Стамов Л. И. Моделирование трехмерных задач отражения ударной волны от поверхности конуса на многопроцессорной супер ЭВМ // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. Секция механики. 17-26 апреля 2017 г., Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова. — 2017. — С. 155—156.
- 17. Михальченко Е. В., Стамов Л. И., Рыбакин Б. П. Решение задач распространения детонации на суперкомпьютерах с графическими процессорами // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. Секция механики. 18-27 апреля 2016 г., Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова. 2016. С. 126—127.
- 18. Нерченко В. А., Никитин В. Ф., Стамов Л. И. Моделирование трехмерных задач отражения детонации от стенки на многопроцессорной супер ЭВМ // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. Секция механики. 18-27 апреля 2016 г., Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова. 2016. С. 133—134.
- 19. Никитин В. Ф., Стамов Л. И., Михальченко Е. В., Скрылева Е. И. Решение трехмерных задач отражения детонации от стенки на многопроцессорной супер-ЭВМ // Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л.Чебышёва: Тезисы. / (Сургут, 16-20 мая 2016 г.): Тезисы докладов. — ИЦ СурГУ, Сургут, 2016. — С. 92—94.

- 20. Михальченко Е. В., Стамов Л. И., Рыбакин Б. П. Решение задач инициирования и распространения детонации на суперкомпьютерах с GPGPU // Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л.Чебышёва: Тезисы. / (Сургут, 16-20 мая 2016 г.): Тезисы докладов. — ИЦ СурГУ, Сургут, 2016. — С. 91—92.
- 21. Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Стамов Л. И. Технология предсказательного моделирования процессов горения и взрыва с применением высокопроизводительных вычислений // XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование». Тезисы. — ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ г. Саров, 2016. — С. 110—111.
- 22. Рыбакин Б. П., Михальченко Е. В., Стамов Л. И. Компьютерное моделирование процессов горения и детонации на гибридных системах // XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование». Тезисы. ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ г. Саров, 2016. С. 102—103.
- 23. Стамов Л. И. Использование графических сопроцессоров для моделирования задач газовой динамики горения // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2015» / Отв. ред. А.И. Андреев, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов. [Электронный ресурс]. М.: МАКС Пресс, 2015.
- 24. Стамов Л. И., Михальченко Е. В. Решение задач газовой динамики горения на гибридных вычислительных системах // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции (28-29 сентября 2015 г., г. Москва). — Изд-во МГУ, Москва, 2015. — С. 611—612.
- 25. Михальченко Е. В., Стамов Л. И. Изучение физико-химических процессов с использованием гибридных вычислительных систем // XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики: сборник трудов (Казань 20-24 августа 2015 г.) Т. 20. Издательство Казанского (Приволжского) федерального университета, г. Казань, 2015. С. 2585—2587.
- 26. Рыбакин Б. П., Стамов Л. И., Михальченко Е. В. Моделирование процессов физико-химической газовой динамики с применением графических процессоров // Сборник докладов. IV Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации. — Минск, 2015. — С. 159—164.
- 27. Стамов Л. И. Моделирование задач газовой динамики с учетом уравнений химической кинетики на гибридных системах // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2014» / Отв. ред. А.И. Андреев, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов. [Электронный ресурс]. М.: МАКС Пресс, 2014.

- 28. Стамов Л. И., Михальченко Е. В. Использование гибридных вычислительных систем при моделировании газодинамических процессов // Международная конференция «Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе», посвященная дню рождения великого русского математика академика П.Л.Чебышёва: Тезисы. ИЦ СурГУ, Сургут, 2014. С. 242—243.
- 29. Стамов Л. И., Михальченко Е. В. Моделирование процессов горения и детонации на гибридных вычислительных системах // Труды Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров» (22-27 сентября 2014 г., г. Новороссийск). — Изд-во МГУ, Москва, 2014. — С. 174—177.
- 30. Рыбакин Б. П., Егорова Е. В., Стамов Л. И. Решение задач горения и детонации на супер-ЭВМ гибридной архитектуры // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. Секция механики. 15-23 апреля 2013 г., Москва, МГУ имени М.В.Ломоносова. — Изд-во МГУ, Москва, 2013. — С. 56—57.
- 31. Стамов Л. И. Исследование задач газовой динамики горения с помощью современных технологий параллельного программирования // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2013» / Отв. ред. А.И. Андреев, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов, К.К. Андреев, М.В. Чистякова. [Электронный ресурс]. М.: МАКС Пресс, 2013.
- 32. Стамов Л. И. Использование графических ускорителей для моделирования процессов горения и детонации // Труды Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма» (23-28 сентября 2013 г., г. Новороссийск). Изд-во МГУ, Москва, 2013. С. 127—129.
- 33. Рыбакин Б. П., Стамов Л. И., Егорова Е. В. Графические и специализированные процессоры путь к эффективному решению ресурсоемких задач физико-химической гидродинамики // Тезисы секционных докладов Санкт-Петербургского научного форума «Наука и общество. Новые технологии для новой экономики России». Издательство Политехнического университета, Санкт-Петербург, 2013. С. 77—80.
- 34. Рыбакин Б. П., Егорова Е. В., Стамов Л. И. Решение задач газодинамики с химической кинетикой на графических процессорах // Труды Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений» (17-22 сентября 2012 г., г. Новороссийск). — Изд-во МГУ, Москва, 2012. — С. 483—490.
- 35. Рыбакин Б. П., Егорова Е. В., Стамов Л. И. О применении графических процессоров для ускорения решения задач газовой динамики // Тезисы секционных докладов Санкт-Петербургского научного форума «Наука и общество. Наука и прогресс человечества». — Издательство Политехнического университета, Санкт-Петербург, 2012. — С. 96—99.

36. Рыбакин Б. П., Стамов Л. И. Использование многопроцессорных вычислительных систем и графических ускорителей для моделирования задач газодинамики // Труды Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: экзафлопсное будущее» (19-24 сентября 2011 г., г. Новороссийск). — Изд-во МГУ, Москва, 2011. — С. 84—89.

### В прочих изданиях

- Бетелин В. Б., Никитин В. Ф., Смирнов Н. Н., Смирнова М. Н., Стамов Л. И., Тюренкова В. В. Вычислительное моделирование задач горения гремучих газовых смесей // Вестник кибернетики. — 2016. — № 2. — С. 25—49.
- Рыбакин Б. П., Егорова Е. В., Стамов Л. И. Ускорение решения задач газовой динамики и горения на графических процессорах // Газовая и волновая динамика. Выпуск 5. Под редакцией Н. Н. Смирнова. Т. 5. Айрис-пресс, Москва, 2013. С. 355—359.

# Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ

- 39. Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Стамов Л. И., Скрылева Е. И., Тюренкова В. В., Михальченко Е. В. Программный комплекс моделирования перехода турбулентного горения в детонацию // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018616761 (дата регистрации 06.06.2018 г.) 2018.
- 40. Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Стамов Л. И., Скрылева Е. И., Тюренкова В. В., Михальченко Е. В. Фокусировка ударной волны и инициирование детонации // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018616781 (дата регистрации 06.06.2018 г.) — 2018.

## Стамов Любен Иванович

Математическое моделирование неравновесных процессов детонации и горения, а также переходных режимов на многопроцессорных ЭВМ

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

\_\_\_\_

Подписано в печать \_\_\_\_. \_\_\_. Заказ № \_\_\_\_\_ Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз. Типография \_\_\_\_\_