



Санкт-Петербургский  
государственный  
университет  
[www.spbu.ru](http://www.spbu.ru)

# СОЗДАНИЕ ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ГАЗА ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ



Для моделирования релаксаций газов в настоящий момент используется проприетарное программное обеспечение с закрытым исходным кодом. Цель настоящей работы реализовать программный комплекс на базе библиотек с открытым исходным кодом



Выпишем систему уравнений:

$$v \frac{dn_{O_2}}{dx} + n_{O_2} \frac{dv}{dx} = R_{O_2}^{\text{react}(0)},$$

$$v \frac{dn_O}{dx} + n_O \frac{dv}{dx} = R_O^{\text{react}(0)},$$

$$(m_O n_O + m_{O_2} n_{O_2}) v \frac{dv}{dx} + kT \frac{dn_O}{dx} + kT \frac{dn_{O_2}}{dx} + (n_O + n_{O_2}) k \frac{dT}{dx} = 0,$$

$$\rho v \frac{dU}{dx} + (n_{O_2} + n_O) kT \frac{dv}{dx} = 0,$$



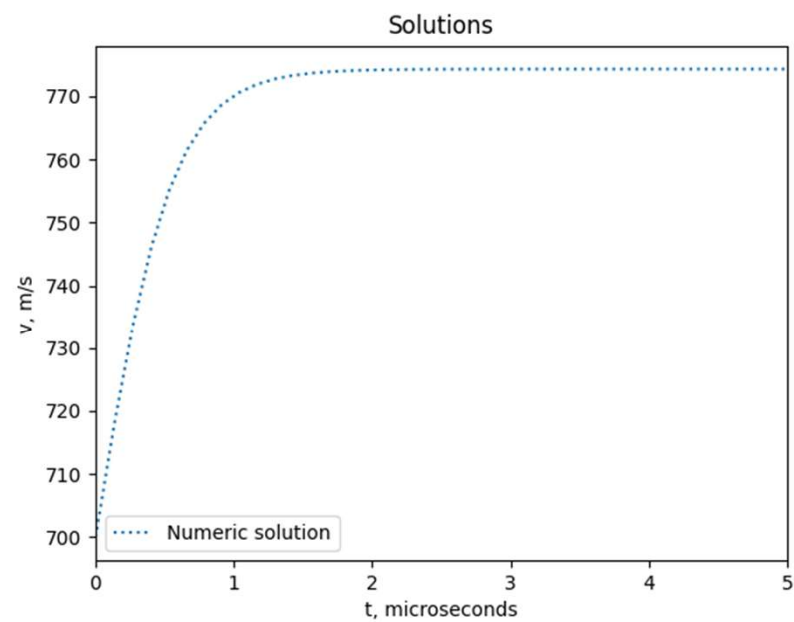
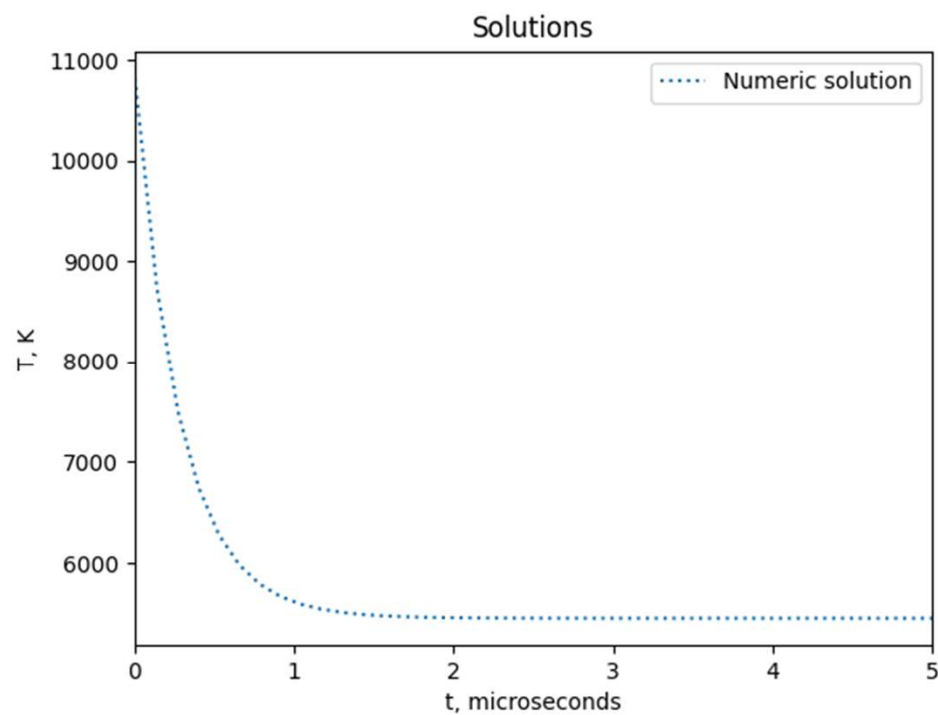
## Конвейер вычислений

```
# Main loop
for i in range(0, N):
    dump_intermediate_data()
    x = solve_linear_system(n_0, n_02, v, T, R_0, R_02)
    if x[0] * x[1] >= 0 or np.abs(x[3]) < eps:
        break
    t_space, res = solve_eq(
        lambda t, Y: x,
        [n_0, n_02, v, T],
        "RK45",
        accuracy, i)

    n_0, n_02, v, T = res
    k_0_diss, k_02_diss = calc_k(n_0, n_02, v, T)
    R_0, R_02 = calc_R(n_0, n_02, v, T, k_0_diss, k_02_diss)
```

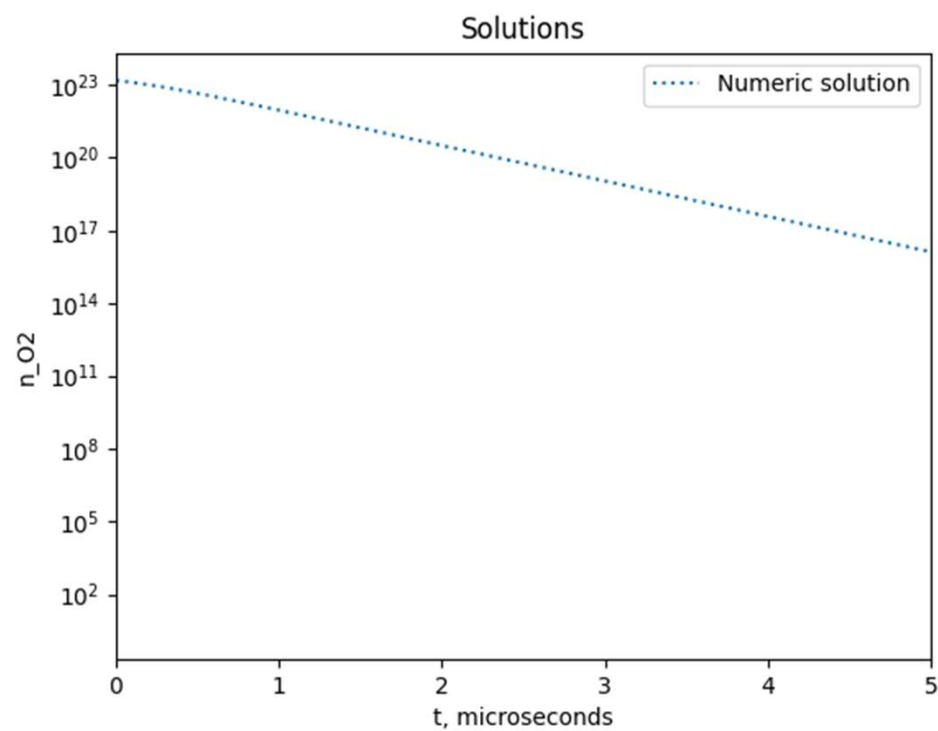
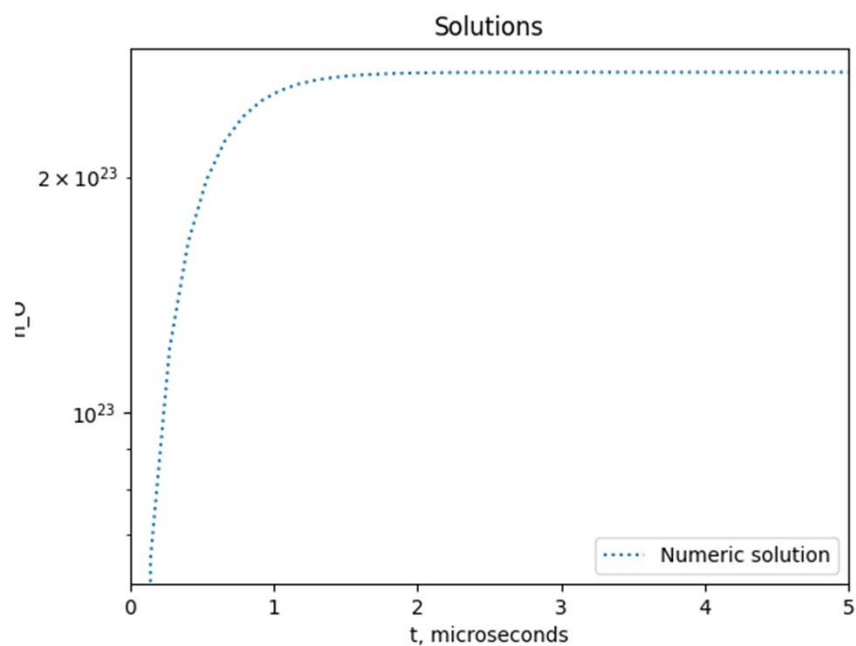


# РЕЗУЛЬТАТЫ





# РЕЗУЛЬТАТЫ





## Время расчётов

```
chansons@chansons: ~/Reposito  X  chansons@chansons: ~/Repo:  X  chansons@chansons: ~  X  +  v
chansons@chansons:~/Repositories/hydroaeromech/02_0/solution$ time ./ex.py -b 0 -e 1 -a 1e-6
14699

real    0m4.855s
user    0m5.365s
sys     0m1.925s
chansons@chansons:~/Repositories/hydroaeromech/02_0/solution$ time ./ex.py -b 0 -e 1 -a 1e-7
147198

real    0m35.275s
user    0m35.482s
sys     0m2.228s
chansons@chansons:~/Repositories/hydroaeromech/02_0/solution$ time ./ex.py -b 0 -e 1 -a 1e-8
1472181

real    5m25.106s
user    5m24.642s
sys     0m2.875s
```



- Решена задача моделирования газа в однотемпературном приближении
- Получено физически обоснованное решение
- Разработан MVP

В будущем: интеграция KAPPA, расчёт в поуровневом приближении, сравнение с экспериментом, поддержка универсальных смесей и начальных условий





Санкт-Петербургский  
государственный университет  
**spbu.ru**