



Санкт-Петербургский
государственный
университет
www.spbu.ru

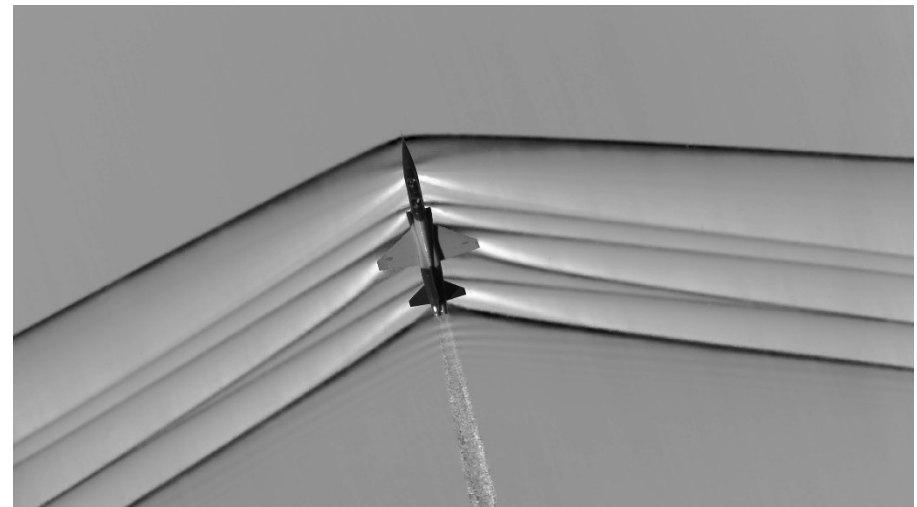
СОЗДАНИЕ ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ГАЗА ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ

студента группы 21.Б12-мм, 3 курса
Семёна Николаевича Зернова

Научный руководитель:
Заведующий кафедрой гидроаэромеханики,
д. ф.-м. н. Кустова Е.В.



Цель — научиться моделировать неравновесные течения на примере ударной волны в смеси O_2/O



Для моделирования релаксаций газов в настоящий момент используется проприетарное программное обеспечение с закрытым исходным кодом.



Выпишем систему уравнений для макропараметров в нулевом приближении метода Энскога–Чепмена:

$$\frac{dn_c}{dt} + n_c \nabla \cdot \mathbf{v} = R_c^{react(0)}, c = 1, \dots, L, \quad (3)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla p = 0, \quad (4)$$

$$\frac{dE}{dt} + (p + E) \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (5)$$



ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для смеси O_2/O , рассматриваемой в стационарной одномерной постановке, полученная система будет иметь вид:

$$v \frac{dn_{O_2}}{dx} + n_{O_2} \frac{dv}{dx} = R_{O_2}^{\text{react}(0)}, \quad (6)$$

$$v \frac{dn_O}{dx} + n_O \frac{dv}{dx} = R_O^{\text{react}(0)}, \quad (7)$$

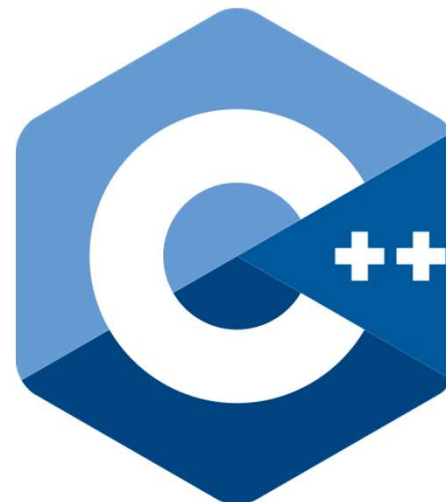
$$(m_O n_O + m_{O_2} n_{O_2}) v \frac{dv}{dx} + kT \frac{dn_O}{dx} + kT \frac{dn_{O_2}}{dx} + (n_O + n_{O_2}) k \frac{dT}{dx} = 0, \quad (8)$$

$$v \frac{dE}{dx} + ((n_{O_2} + n_O) kT + E) \frac{dv}{dx} = 0, \quad (9)$$



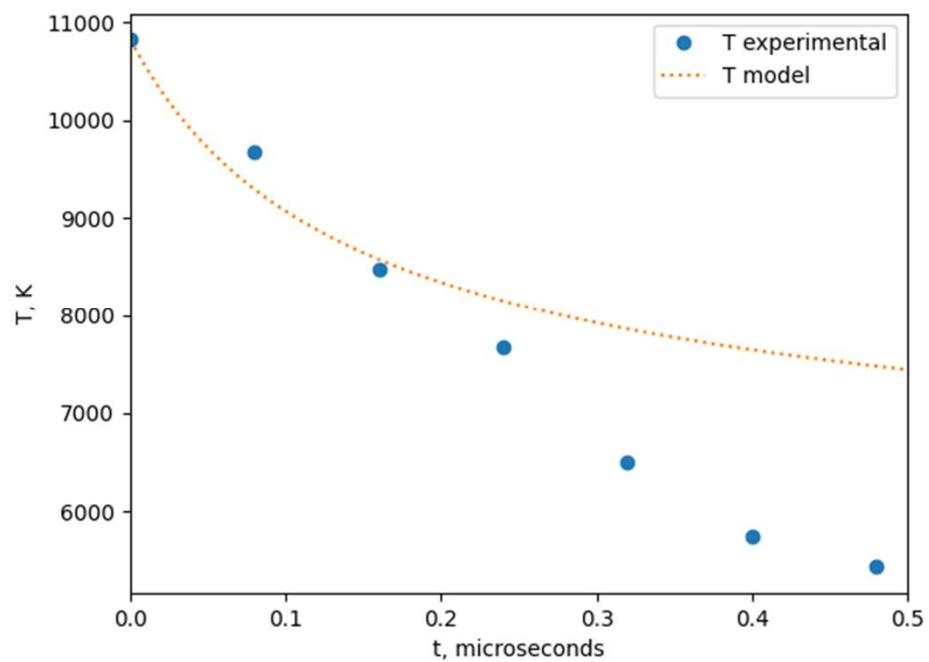
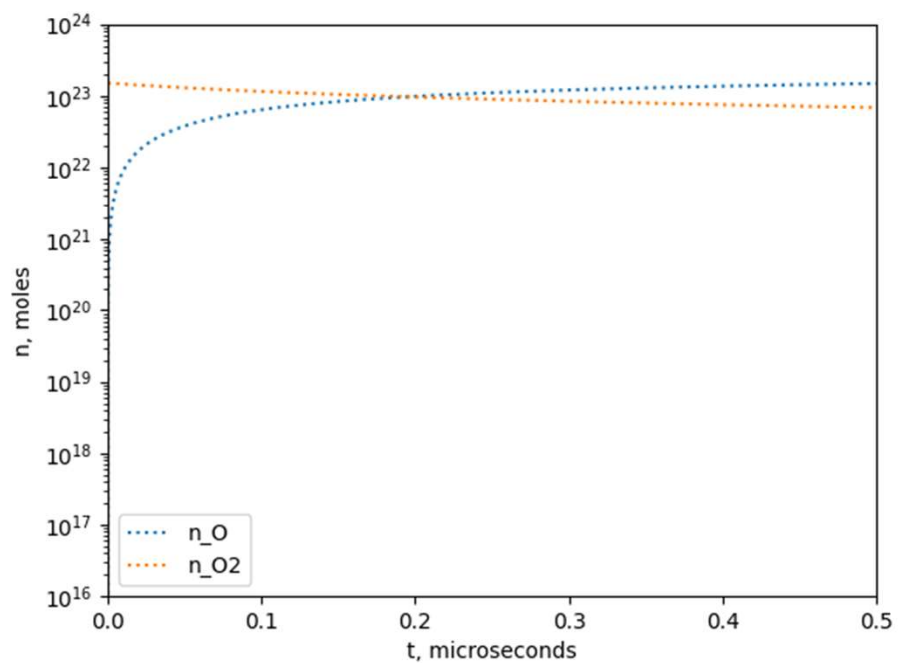
Технологический стек:

- Python
- C++ (KAPPA)





РЕЗУЛЬТАТЫ





Производительность и точность

В результате запусков с разной точностью была замерено время решения и максимальное отклонение от законов сохранения:

Точность	Число итераций	Время, с	Ошибка 1	Ошибка 2	Ошибка 3
1e-5	50000	7.795	0.0001410	1.37e-08	0.0015131
1e-6	500000	52.578	1.42e-05	1.31e-09	0.0001417
1e-7	5000000	454.828	2.15e-06	1.30e-10	1.35e-05



- Решена задача моделирования газа в однотемпературном приближении
- Однотемпературное приближение показывает серьёзные расхождения с экспериментом
- Получено физически обоснованное решение
- Разработан MVP



В будущем:

- рассмотреть возможность использования других языков программирования или JIT-компиляции Python,
- интеграция KARRA,
- расчёт в поуровневом приближении,
- сравнение с экспериментом,
- поддержка различных смесей



Санкт-Петербургский
государственный университет
spbu.ru