

Создание программного продукта для моделирования химической релаксации газа за ударной волной

Зернов С. Н., СПбГУ, Санкт-Петербург st095228@student.spbu.ru

Аннотация

В данной работе описывается численное моделирование макропараметров газа за ударной волной с учетом неравновесных химических реакций диссоциации. Для расчета макропараметров смеси O_2/O была использована система уравнений Чепмена-Энскога [1] в нулевом приближении в сочетании с однотемпературной моделью.

Был разработан прототип на языке Python с возможностью выбора временного интервала, абсолютной точности разбиения и опцией включения профилирования. Последнее позволило обнаружить проблемы с производительностью, которые будут учтены при создании основного программного продукта. Для верификации модели были оценены ошибки в законах сохранения массы, импульса и энергии на каждом шаге решения системы дифференциальных уравнений. Собранные данные показывают, что абсолютная величина ошибки пропорциональна абсолютной точности разбиения и приемлемо мала.

Кроме того, была модифицирована библиотека с открытым исходным кодом KAPPA [2]: обновлена система сборки, версия стандарта C++ и добавлен слой C API. C API позволяет интегрировать стороннее программное обеспечение в новый проект, в нашем случае — специфическую функцию для расчета коэффициентов скорости диссоциации. Эта техника показывает, что возможно повторное использование существующих проектов через межъязыковое взаимодействие с приемлемым влиянием на производительность.

Данная работа дополняет текущие представления о проектировании программных продуктов в сложной междисциплинарной области кинетической теории и высокопроизводительных вычислений, создавая фундамент для будущих проектов.

Список литературы

- [1] Нагнибеда Е. А., Кустова Е. В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. – Изд.-во Санкт-Петерб. ун-та, 2003.
- [2] L. Campoli, G.P. Oblapenko, E.V. Kustova, KAPPA: Kinetic approach to physical processes in atmospheres library in C++, Computer Physics Communications, Volume 236, 2019, Pages 244-267, <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.10.016>.