

# Программный комплекс для высокопроизводительных расчетов пространственных течений реагирующих сред

*Мануйлович И.С.,  
Левин В.А., Марков В.  
В.*

Институт механики МГУ им. М.В.  
Ломоносова

**Программный комплекс** позволяет моделировать 1D, 2D, 3D течения многокомпонентной инертной и реагирующей среды в открытом пространстве, в замкнутых объёмах и каналах со сложной геометрией. Программный комплекс позволяет изучать взрывные и детонационные процессы в газах.

ChemFlowSimulation – расчет газодинамики реагирующих систем

Файл Настройки Справка

Очередь расчетов

№	Название
1	3DTest

Добавить... Дублировать...  
Изменить... Удалить  
Загрузить... Перейти к папке  
Начать расчет

Функции формы границ

№	Функция
1	$X = -p * 0.5; Y = p * \sqrt{0.75}; Z = q$
2	$X = 1 - p * 0.5; Y = p * \sqrt{0.75}; Z = q$
3	$X = q; Y = 0; Z = p$
4	$X = q - 0.5; Y = \sqrt{0.75}; Z = p$
5	$X = p - q * 0.5; Y = q * \sqrt{0.75}; Z = 0$
6	$X = p - q * 0.5; Y = q * \sqrt{0.75}; Z = 1$
7	$X = -p * 0.5 - 0.5; Y = p * \sqrt{0.75} - s...$
8	$X = q * 0.5 - 0.5; Y = q * \sqrt{0.75} - s...$
9	$X = q * 0.5 - 1; Y = q * \sqrt{0.75}; Z = p$
10	$X = (p - q - 1) * 0.5; Y = (p + q - 1) * \sqrt{0.75}; Z = p$
11	$X = (p - q - 1) * 0.5; Y = (p + q - 1) * \sqrt{0.75}; Z = p$
12	$X = 0.5 - p; Y = -\sqrt{0.75}; Z = q$
13	$X = q * 0.5 + 0.5; Y = q * \sqrt{0.75} - s...$
14	$X = p * 0.5 - q + 0.5; Y = p * \sqrt{0.75} - s...$
15	$X = p * 0.5 - q + 0.5; Y = p * \sqrt{0.75} - s...$

Добавить... Изменить... Удалить  
Загрузить... Изменить направление...

Функции начальных условий

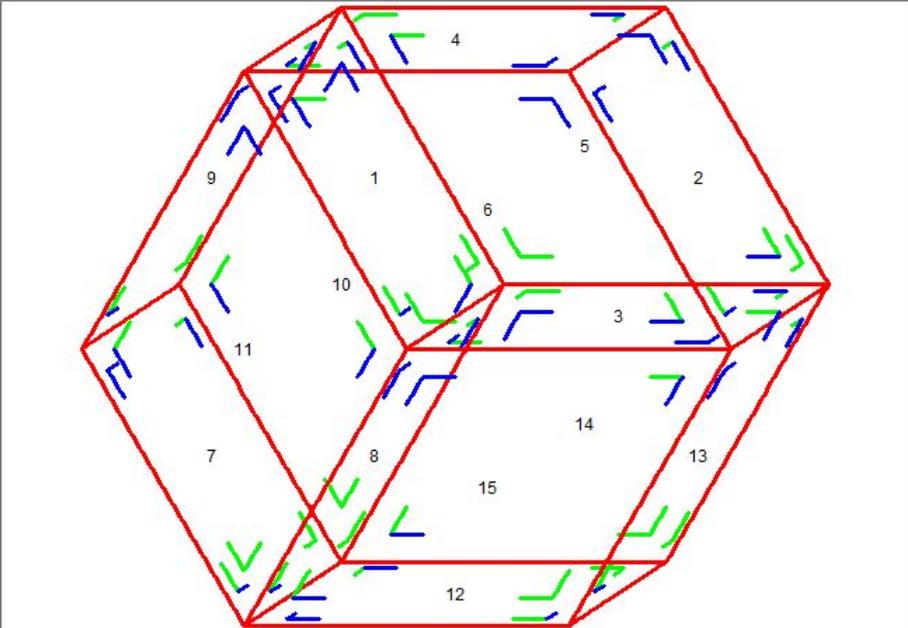
№	Начальное условие
1	$u=0; v=0; w=0; p=x+y+z < 0.5 ? 101325 * 10000 / 293.15 : 101...$

Добавить...  
Изменить...  
Удалить

Функции граничных условий

№	Граничное условие
---	-------------------

Добавить...  
Изменить...  
Удалить



Расчетные блоки

№	"Левая"	"Правая"	"Нижняя"	"Верхняя"	"Дальняя"	"Ближняя"	Нач. усл.	Разбиение
1	1;0;меж. бл.	2;1;твердая	3;0;твердая	4;1;твердая	5;0;твердая	6;1;твердая	1	50x50x50
2	7;0;твердая	1;1;меж. бл.	8;0;меж. бл.	9;1;твердая	10;0;твер...	11;1;твер...	1	50x50x50
3	12;0;твер...	3;1;твердая	13;0;твер...	8;1;меж. бл.	14;0;твер...	15;1;твер...	1	50x50x50

Добавить... Изменить... Удалить

Параметры среды

№	Имя	Mu	gamma
1	СЭН8	44.1	1.04
2	O2	32.0	1.29
3	H2O	18.0	1.21
4	CO2	44.0	1.17
5	N2	28.0	1.32

Свойства смеси...

Химическая кинетика

Реакции включены?

Химическая кинетика...

Основные параметры

Коэффициент запаса: 0.5

Конец расчета

Кол-во шагов 2000  
 Время

Вывод

Вывод картины течения

через 1000 шагов

Отображать Шлирен-диаграмму

Дополнительные параметры

Показывать:  кол-во шагов  
 время

Дополнительно...

# Заложенная математическая модель. Уравнения движений многокомпонентной реагирующей

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v)}{\partial y} = \omega_i,$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(p + \rho v^2)}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{\partial(H - p)}{\partial t} + \frac{\partial(Hu)}{\partial x} + \frac{\partial(Hv)}{\partial y} = 0,$$

$$H = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2}{2}.$$

Уравнения

Эйлера

– уравнения плоских движений

$N$  – число компонентов

смеси,

$\rho_i$

– скорость изменения

$h_i$  за счет химических

$H$  реакций,

– энтальпия  $i$ -го

компонента,  $h_i = c_{0i} + c_{pi}T$

– полная энтальпия

– уравнения

осесимметричных движений

Термическое

уравнение

состояния:  $p = \sum_i (\rho_i / \mu_i) R_0 T$

$$\frac{\partial(\rho r)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho ur)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vr)}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial(\rho_i r)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i ur)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i vr)}{\partial r} = \omega_{ir},$$

$$\frac{\partial(\rho ur)}{\partial t} + \frac{\partial[(p + \rho u^2)r]}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uvr)}{\partial r} = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho vr)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uvr)}{\partial x} + \frac{\partial[(p + \rho v^2)r]}{\partial r} = p,$$

$$\frac{\partial[(H - p)r]}{\partial t} + \frac{\partial(Hur)}{\partial x} + \frac{\partial(Hvr)}{\partial r} = 0,$$

$$H = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2}{2}.$$

# Заложенная математическая модель. Уравнения течений многокомпонентной реагирующей среды

Используются уравнения Эйлера для плоских, осесимметричных и

трехмерных течений:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_i v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_i w)}{\partial z} = \omega_i,$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(p + \rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(p + \rho w^2)}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial(H - p)}{\partial t} + \frac{\partial(Hu)}{\partial x} + \frac{\partial(Hv)}{\partial y} + \frac{\partial(Hw)}{\partial z} = 0,$$

$$H = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i + \rho \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2}.$$

# Химическая кинетика горения

Используется **одностадийная кинетика горения**, позволяющая быстро проводить расчеты задач с детонационными волнами, в том числе задач с ячеистой **Детонацией**.

Пропановоздушная смесь, N=5 компонентов: C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>

$$C_3H_8 + 5O_2 + 20N_2 \rightarrow 4H_2O + 3CO_2 + 20N_2$$

Скорость реакции:

$$\frac{\omega_{C_3H_8}}{\mu_{C_3H_8}} = \frac{\omega_{O_2}}{5\mu_{O_2}} = -\frac{\omega_{H_2O}}{4\mu_{H_2O}} = -\frac{\omega_{CO_2}}{3\mu_{CO_2}} = AT^\beta e^{-\frac{E}{R_0T}} \left( \frac{\rho_{C_3H_8}}{\mu_{C_3H_8}} \right)^a \left( \frac{\rho_{O_2}}{\mu_{O_2}} \right)^b, \quad \omega_{N_2} = 0$$

$A, E, a, b, \beta$  – константы,  $E$  – энергия активации

Реализована возможность расчетов с детальной **многостадийной химической кинетикой**, определяемой набором реакций и коэффициентами, вводимыми в графическом интерфейсе пользователем или загружаемыми

- Программный комплекс основан на модифицированном методе С.К. Годунова, хорошо зарекомендовавшем себя при расчете течений газовых смесей с взрывными и детонационными волнами
- Расчет нестационарных плоских, осесимметричных и трехмерных течений
- В интерфейсе реализована очередь расчетов, позволяющая производить последовательный или параллельный расчет нескольких задач, а также подготовку незапущенных расчетов
- Каждому расчету соответствует конфигурационный файл, отслеживающий изменения всех параметров расчета. Старые расчеты могут быть проведены заново путем загрузки из файла. Все расчеты четко структурированы в файловой системе. Удобно проводить многопараметрические расчеты с помощью функции полного дублирования расчетов, а затем изменения их параметров
- В процессе расчета могут записываться в файлы поля газодинамических параметров (компоненты скорости, плотность, давление, температура, число Маха, концентрации компонентов и др.), их зависимости от времени в заданных точках или зависимости от времени интегральных характеристик, таких как сила или массовый расход
- Произведено распараллеливание расчета задач на все ядра системы – процессора или нескольких процессоров сервера.  
Нет ограничения на максимальную загрузку процессора

# Функции по подготовке состава и характеристик смеси

В вычислительный комплекс заложена база данных NASA по

термодинамичес-

ким характеристикам различ

может быть использовано в р  
Реализованы возможности

аппроксимации

термодинамических

функций

Изменение состава и характеристик смеси

№	Имя	Mu	gamma
1	C3H8	44.1	1.04
2	O2	32.0	1.29
3	H2O	18.0	1.21
4	CO2	44.0	1.17
5	N2	28.0	1.32

Задать стандартный набор

Воздух H2O, CO2  
N2, O2 H2O, CO2, N2  
CH4, O2, H2O, CO2 CH4, O2, H2O, CO2, N2  
C2H2, O2, H2O, CO2 C2H2, O2, H2O, CO2, N2  
C2H4, O2, H2O, CO2 C2H4, O2, H2O, CO2, N2  
C2H6, O2, H2O, CO2 C2H6, O2, H2O, CO2, N2  
C3H8, O2, H2O, CO2 C3H8, O2, H2O, CO2, N2

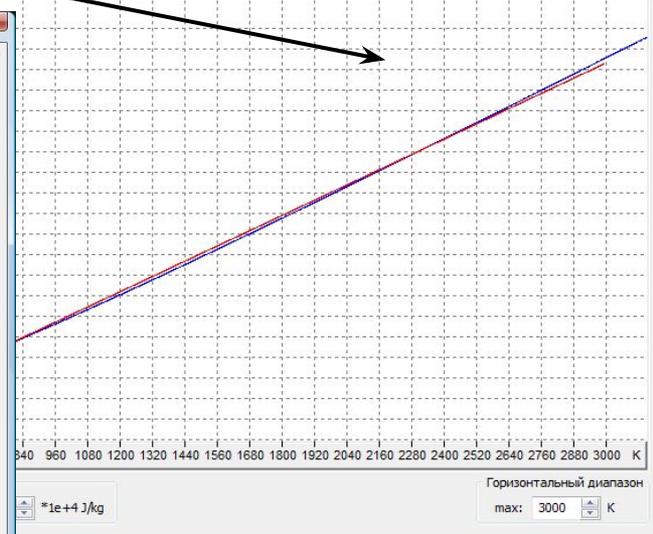
Добавить

O O2 O3 OH NO2 H2O H2O2 H2 H  
CO2 HCO CH2O C3H6 i-C3H7 n-C3H7 C3H8  
CO C2H C2H2 C2H3 C2H4 C2H5 C2H6  
C CH CH2 CH3 CH4  
N2 Ar  
Еще...

Молярная масса: 28.0134 Название компонента: N2  
Показатель адиабаты: 1.31580752; C0 = -450380.286305 C1 = 1236.63270703  
Линейная аппроксимация  
Диапазон: 290 K - 3000 K  
Добавить Изменить Рассчитать

База данных NASA по термодинамическим характеристикам химических веществ

№	Название	Формула	Состояние	Мол. вес	Теплота обр.	Температурные диапазоны	Код ссылки	Комментарии, источник данных
1	e-	E1	Газ	0.000548...	0.000000e+00	298.15-1000-6000-20000	g12/98	Ref-Species. Chase, 1998 3/82.
2	Ag	AG1	Газ	107.8682	2.849000e+05	200-1000-6000-20000	g10/97	Hf:Cox, 1989. Moore, 1971. Gordon, 1999.
3	Ag+	AG1E-1	Газ	107.8676...	1.022094e+06	298.15-1000-6000-20000	g10/97	Moore, 1971. Gordon, 1999.
4	Ag-	AG1E1	Газ	107.8687...	1.530787e+05	298.15-1000-6000-20000	g10/97	Hotop, 1985. Gordon, 1999.
5	AL	AL1	Газ	26.981538	3.300000e+05	200-1000-6000-20000	g12/97	Hf:Cox, 1989. Kaufman, 1991b. Gordon, 1999.
6	AL+	AL1E-1	Газ	26.9809894	9.130151e+05	298.15-1000-6000-20000	g 1/98	Kaufman, 1991b. Moore, 1971. Gordon, 1999.
7	AL-	AL1E1	Газ	26.9820866	2.810901e+05	298.15-1000-6000-20000	g 3/97	Chase, 1998 p65 6/83. EA:Hotop, 1985. Gordon, 1999.
8	ALBr	AL1BR1	Газ	106.885538	1.432501e+04	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p184 pt2 p148.
9	ALBr2	AL1BR2	Газ	186.789538	-1.406621e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p186 pt2 p149.
10	ALBr3	AL1BR3	Газ	266.693538	-4.104767e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p188 pt2 p151.
11	ALC	AL1C1	Газ	38.992238	6.822835e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p205 pt2 p165.
12	ALC2	AL1C2	Газ	51.002938	6.756158e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p206 pt2 p166.
13	ALCL	AL1CL1	Газ	62.434538	-5.100744e+04	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p168 pt2 p131.
14	ALCL+	AL1CL1E-1	Газ	62.4339894	8.618493e+05	298.15-1000-6000	j 6/76	Chase, 1998 p73.
15	ALCL2	AL1CL2	Газ	97.887538	-2.408743e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p171 pt2 p132.
16	ALCL3	AL1CL3	Газ	133.340538	-5.846789e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p173 pt2 p134.
17	ALF	AL1F1	Газ	45.9799412	-2.640604e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p151 pt2 p116.
18	ALF+	AL1F1E-1	Газ	45.9793926	6.922336e+05	298.15-1000-6000	j 6/76	Chase, 1998 p92.
19	ALFCL	AL1FCL1	Газ	81.4329412	-4.364099e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p182 pt2 p144.
20	ALFCL2	AL1FCL2	Газ	116.8859...	-7.913954e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p183 pt2 p146.
21	ALF2	AL1F2	Газ	64.9783444	-6.317642e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p153 pt2 p117.
22	ALF2-	AL1F2E1	Газ	64.978893	-8.532307e+05	298.15-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p154 pt2 p118.
23	ALF2CL	AL1F2CL1	Газ	100.4313...	-9.991281e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p182 pt2 p145.
24	ALF3	AL1F3	Газ	83.9767476	-1.209277e+06	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p157 pt2 p120.
25	ALF4-	AL1F4E1	Газ	102.9756...	-1.951601e+06	298.15-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p159 pt2 p121.
26	ALH	AL1H1	Газ	27.989478	2.492508e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p139 pt2 p106.
27	ALHCL	AL1H1CL1	Газ	63.442478	1.052197e+04	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p178 pt2 p138.
28	ALHCL2	AL1H1CL2	Газ	98.895478	-3.512790e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p179 pt2 p140.
29	ALHF	AL1HF1	Газ	46.9878812	-1.826145e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p164 pt2 p125.
30	ALHFCL	AL1HF1CL1	Газ	82.4408812	-5.552445e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p184 pt2 p147.
31	ALHF2	AL1HF2	Газ	65.9862844	-7.652992e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p166 pt2 p127.
32	ALH2	AL1H2	Газ	28.997418	2.767749e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p142 pt2 p107.
33	ALH2CL	AL1H2CL1	Газ	64.450418	-1.063454e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p179 pt2 p139.
34	ALH2F	AL1H2F1	Газ	47.9958212	-3.166559e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p165 pt2 p126.
35	ALH3	AL1H3	Газ	30.005358	1.289961e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p145 pt2 p109.
36	ALI	AL1I1	Газ	153.886008	6.739502e+04	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p191 pt2 p153.
37	ALI2	AL1I2	Газ	280.790478	-3.381295e+04	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p193 pt2 p154.
38	ALI3	AL1I3	Газ	407.604048	-1.012326e+05	200-1000-6000	tpis96	Gurvich, 1996a pt1 p195 pt2 p156.



База данных NASA  
содержит 2085  
записей для  
различных веществ

# Расчетные сетки

В расчетах используются структурированные многоблочные подвижные сетки. Границы могут быть криволинейными, задаваемыми параметрически в виде функций координат от параметров вдоль кривых или поверхностей. Можно задавать число ячеек разбиения каждого блока, производить сгущение линий сетки и т. п. Расчетная область может иметь любое число компонент связности.

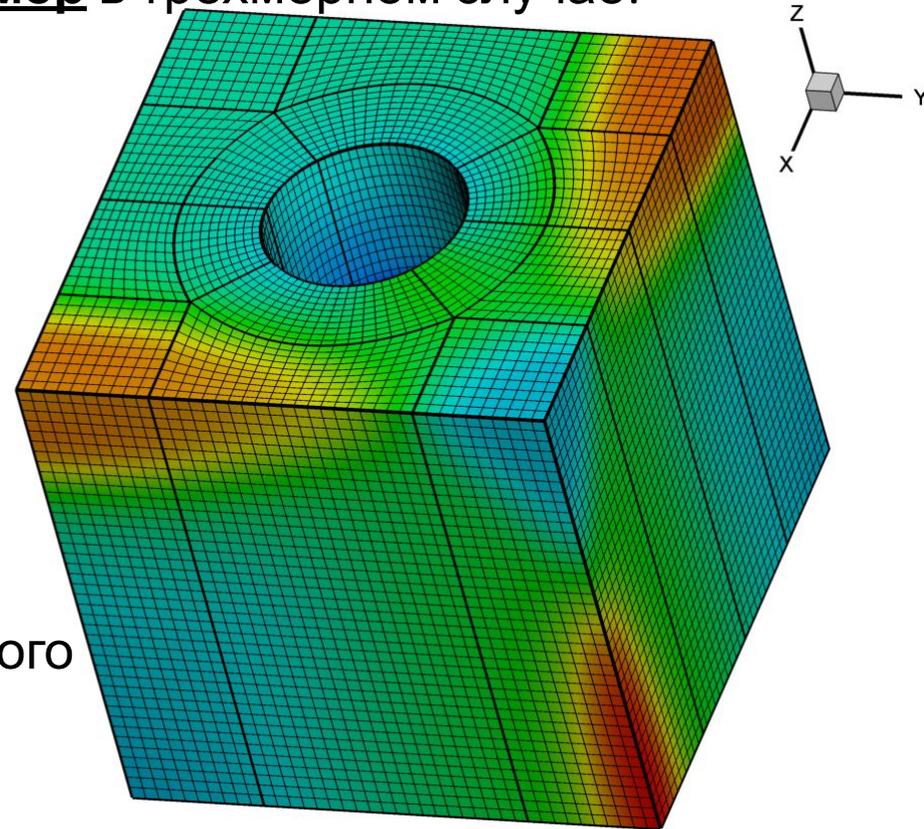
**Пример** отдельного участка расчетной сетки (жирные линии – границы блоков)

в двумерном случае:



Возможно задание явного закона перемещения границ со временем

**Пример** в трехмерном случае:



# Начальные, граничные условия и энергоподвод

- **Начальные условия** задаются с помощью функций газодинамических параметров от координат. Возможно задание любых неоднородностей или разрывных распределений по температуре, концентрациям компонентов и т. п.
- В качестве **граничных условий** в зависимости от типа границы используются:
  - условие непротекания, условие для подвижной ударной волны или бесконечно тонкой детонационной волны, «выходное» условие, условие сверхзвукового втока, газодинамические параметры которого задаются с помощью произвольных задаваемых пользователем функций газодинамических параметров от координат и времени, смешанное условие, моделирующее действие клапана, причем возможно задание моментов открытия/закрытия в виде бинарной функции времени
- Возможно задание с помощью функции координат и времени энергоисточника

Изменение начального условия

вдоль оси x	$u(x,y) =$	0
Компоненты скорости		
вдоль оси y	$v(x,y) =$	0
Давление	$p(x,y) =$	101325
Температура	$T(x,y) =$	293.15
Мольные доли (разделитель - ; нормировка необязательна)	$(x,y):$	1;5;0;0;20

OK Отмена

Функции начальных условий

№	Начальное условие	
1	$u=0;v=0;p=101325*0.001;T=300;M.доли:0;5;0;0;20$	Добавить... Изменить... Удалить
2	$u=0;v=0;p=101325*50;T=600;M.доли:1;5;0;0;20$	

Функции граничных условий

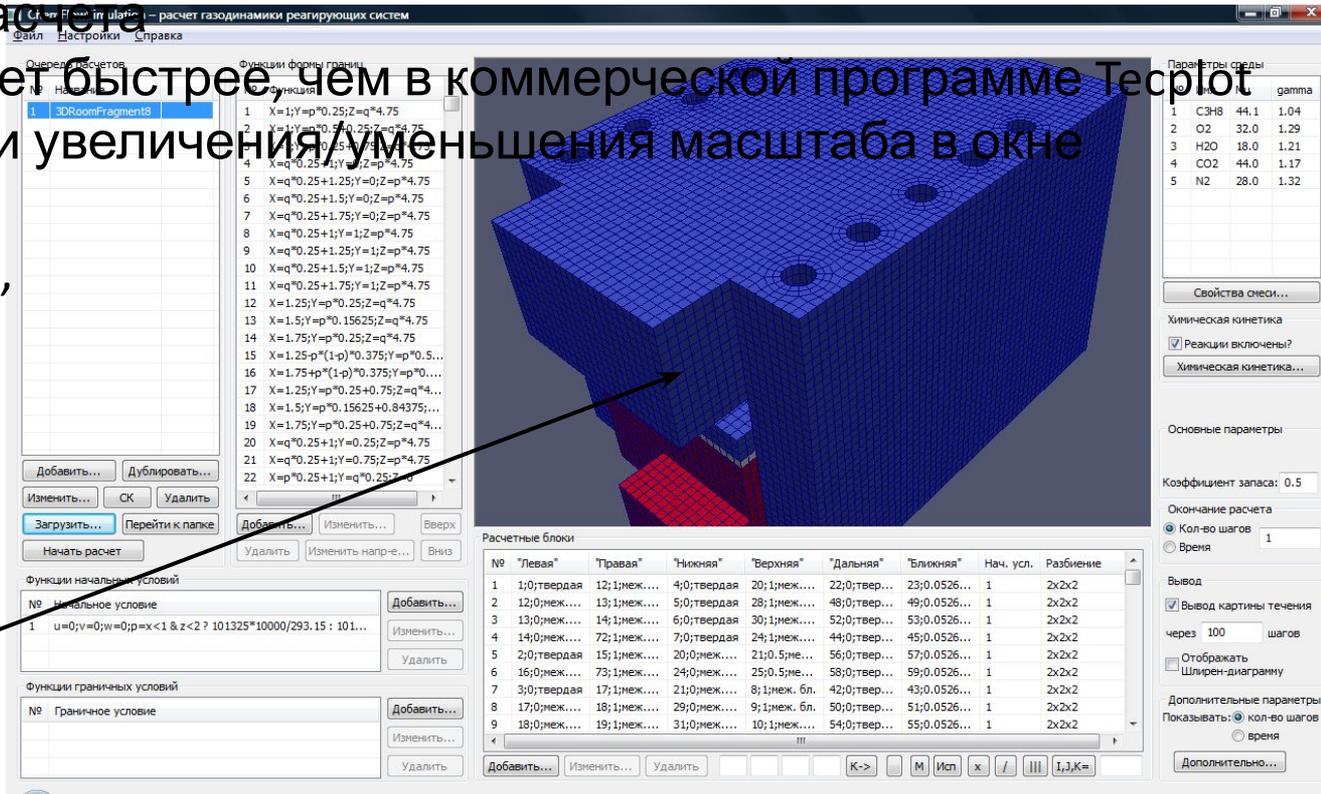
№	Граничное условие	
		Добавить... Изменить... Удалить

# Визуализация результатов расчета

- Основана на мощной библиотеке VTK (Visualization ToolKit) с открытым исходным кодом, использующей аппаратные ресурсы современных видеокарт
- Нет необходимости использовать сторонние, в том числе платные, программы
- Визуализация данных, загружаемых из файлов, или текущих данных расчета.

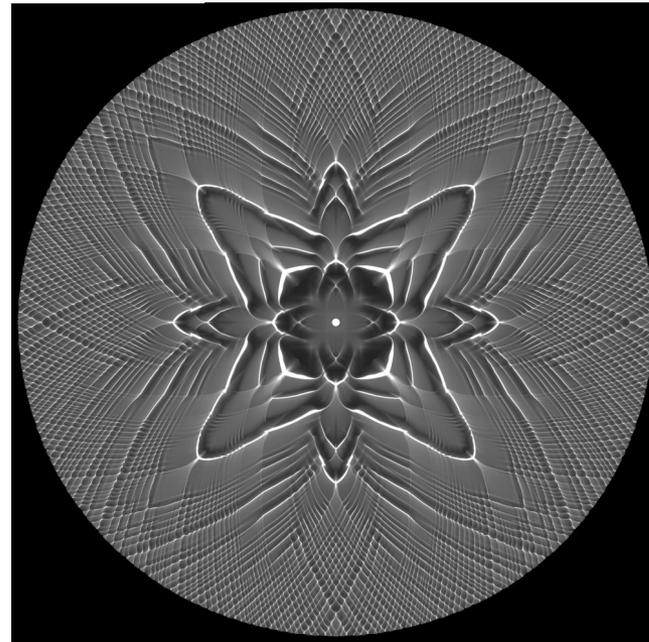
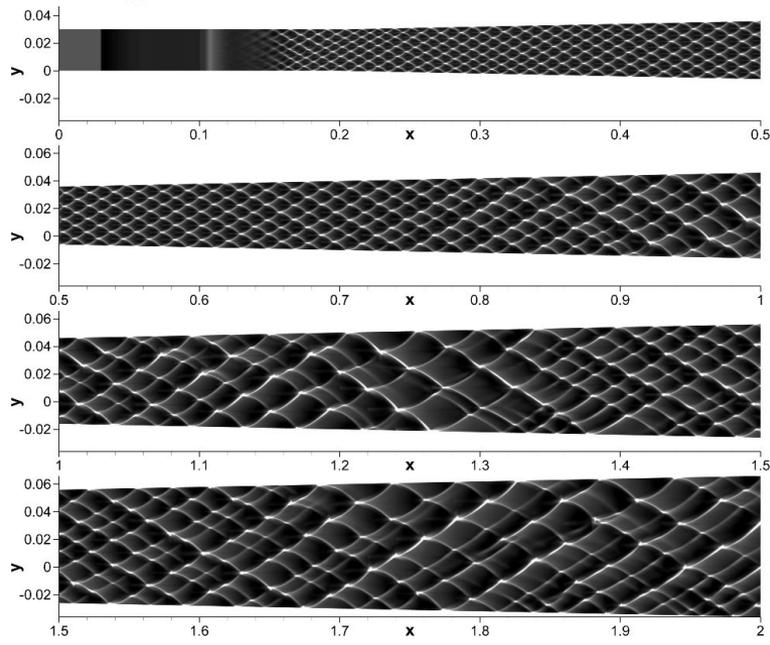
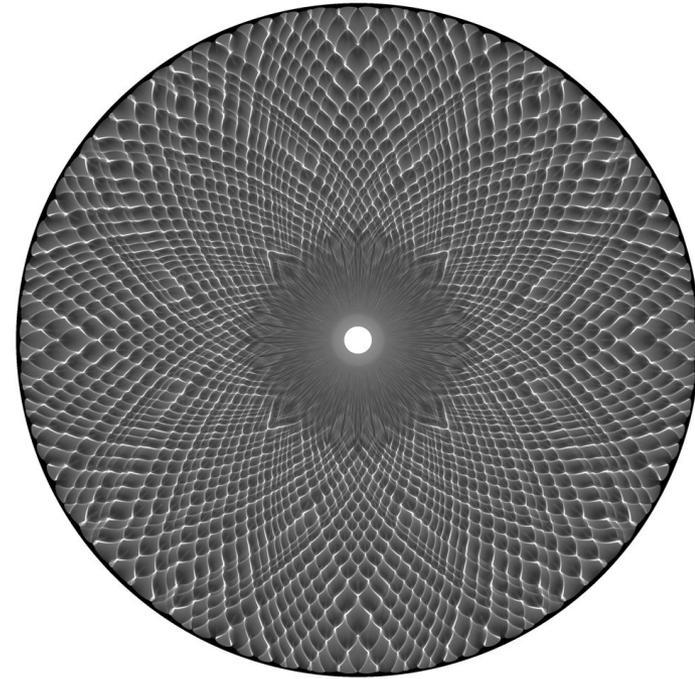
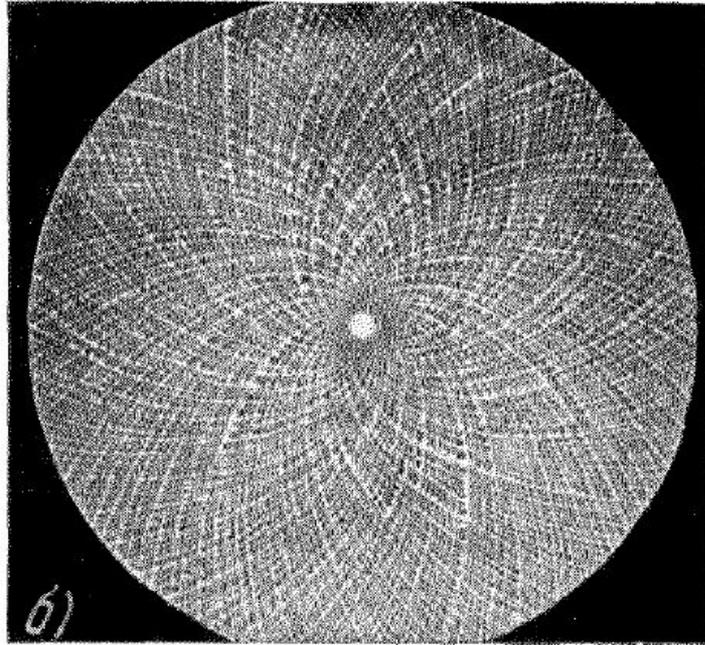
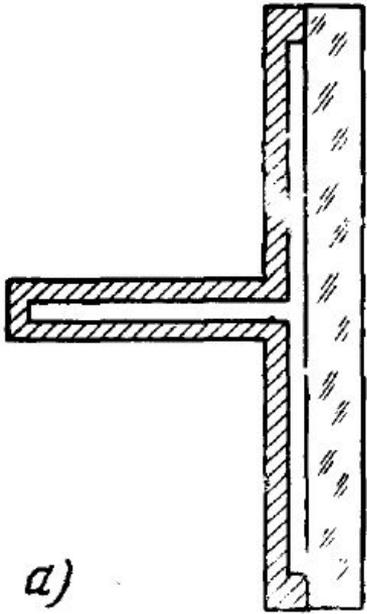
В последнем случае пользователь наблюдает динамически меняющуюся

- Функции в процессе расчета
- Визуализация, работает быстрее, чем в коммерческой программе Tecplot
- Реализованы функции увеличения/уменьшения масштаба в окне визуализации
- Экспорт в видеофайл, в том числе в процессе расчета задач



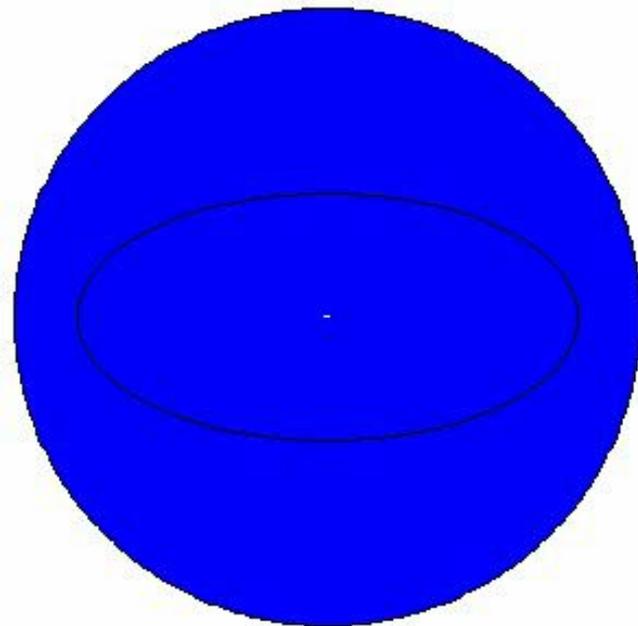
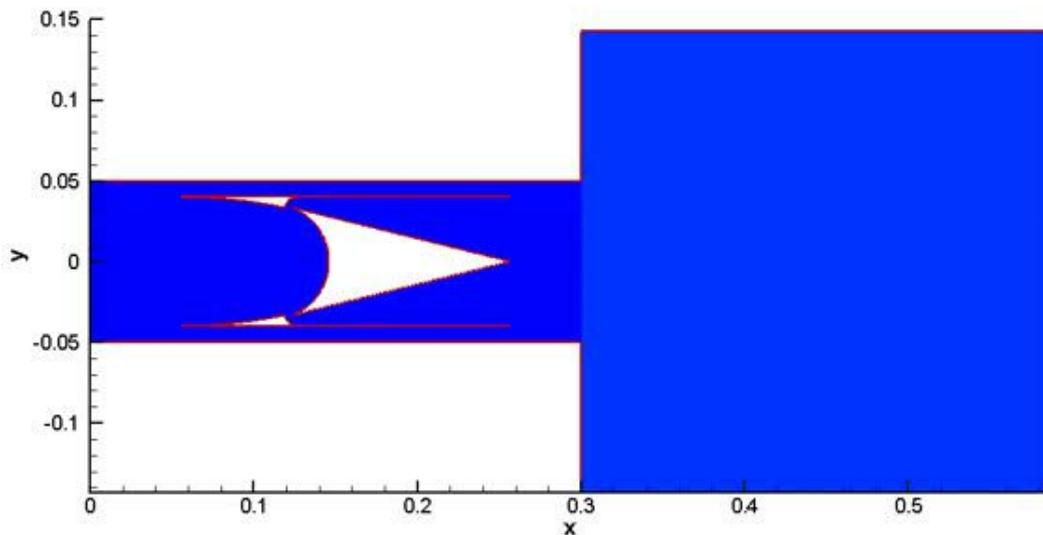
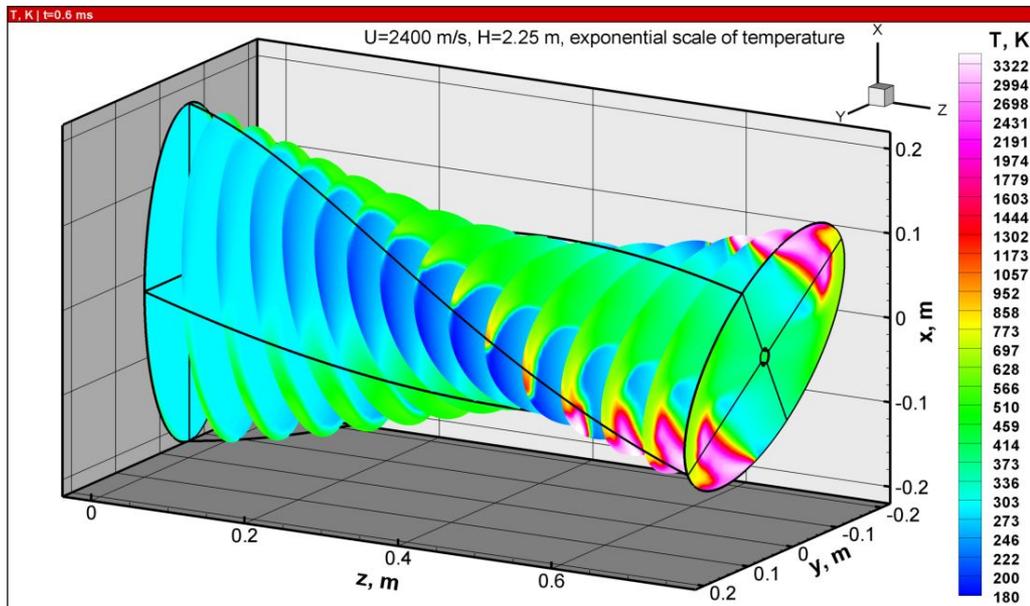
Окно визуализации полей газодинамических параметров

# Примеры расчетов ячеистой



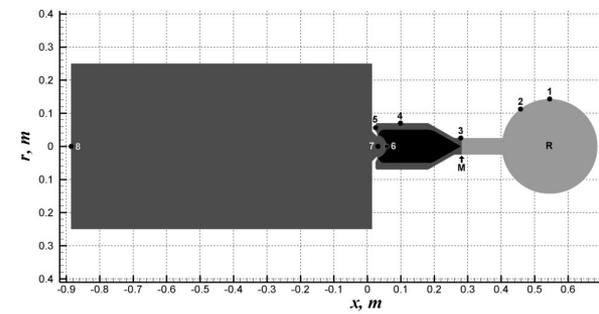
# Некоторые примеры расчетов

расчетов

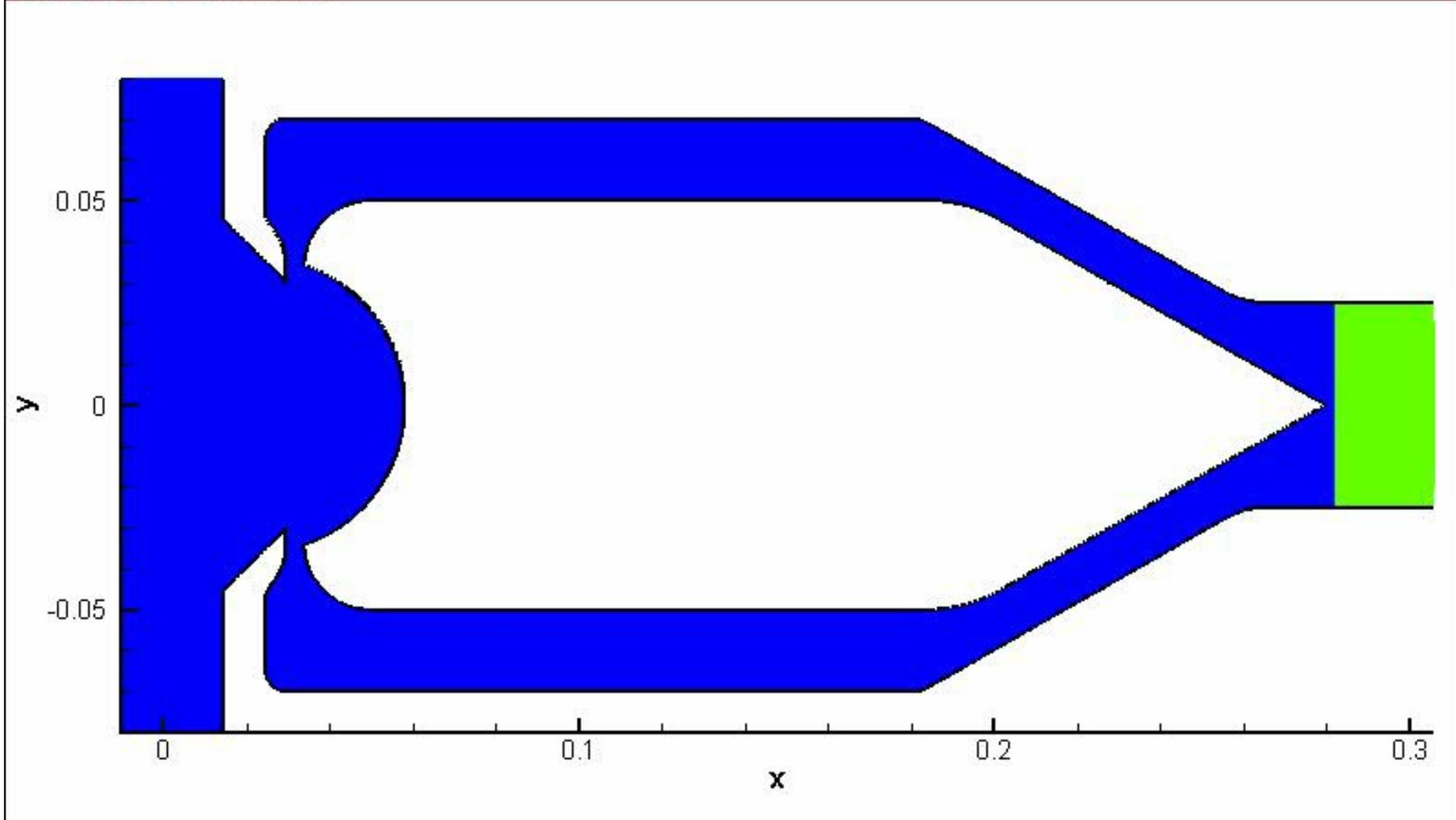


# Пример расчета. Поле температуры в экспериментальной установке

НИИ механики МГУ



T, K | 28 Jan 2010 | t=0.0000000000000000



# Детонация во вращающемся цилиндре с уступами

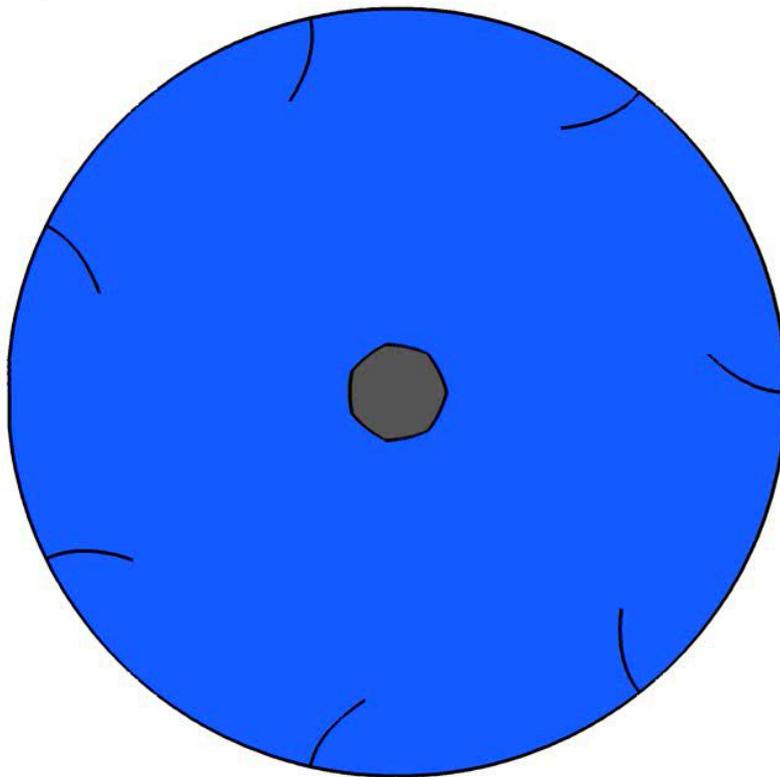
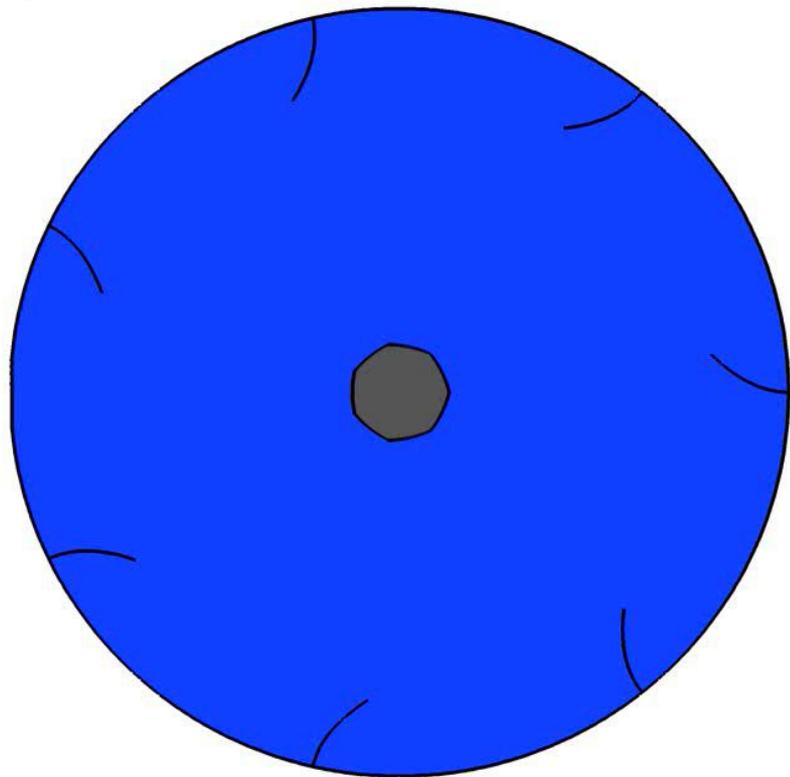
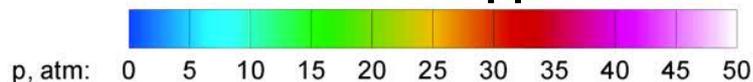
параболической формы

Величина критической угловой скорости, начиная с которой сразу формируется детонация, для  $r = 20$  см равна  $\omega = 7000$  рад/с и уменьшается с ростом  $r$  согласно равенству  $\omega r = const$

Поле температуры

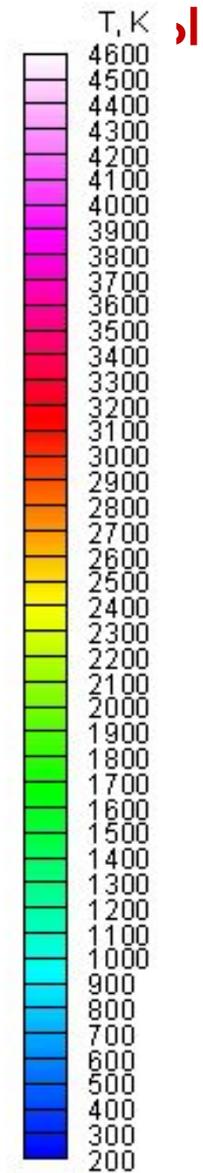
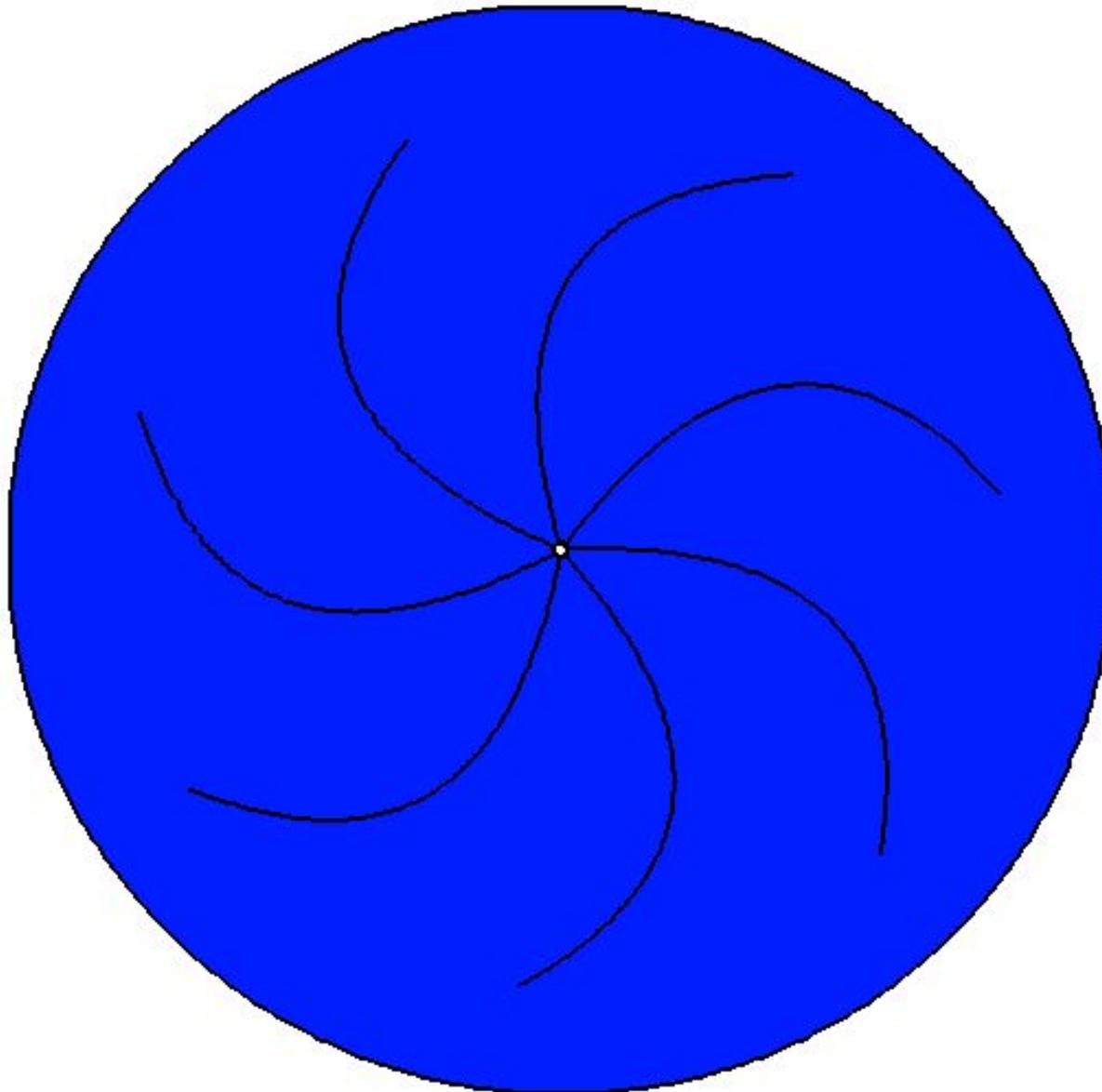
$$\omega = 7000 \text{ рад/с}$$

Поле давления

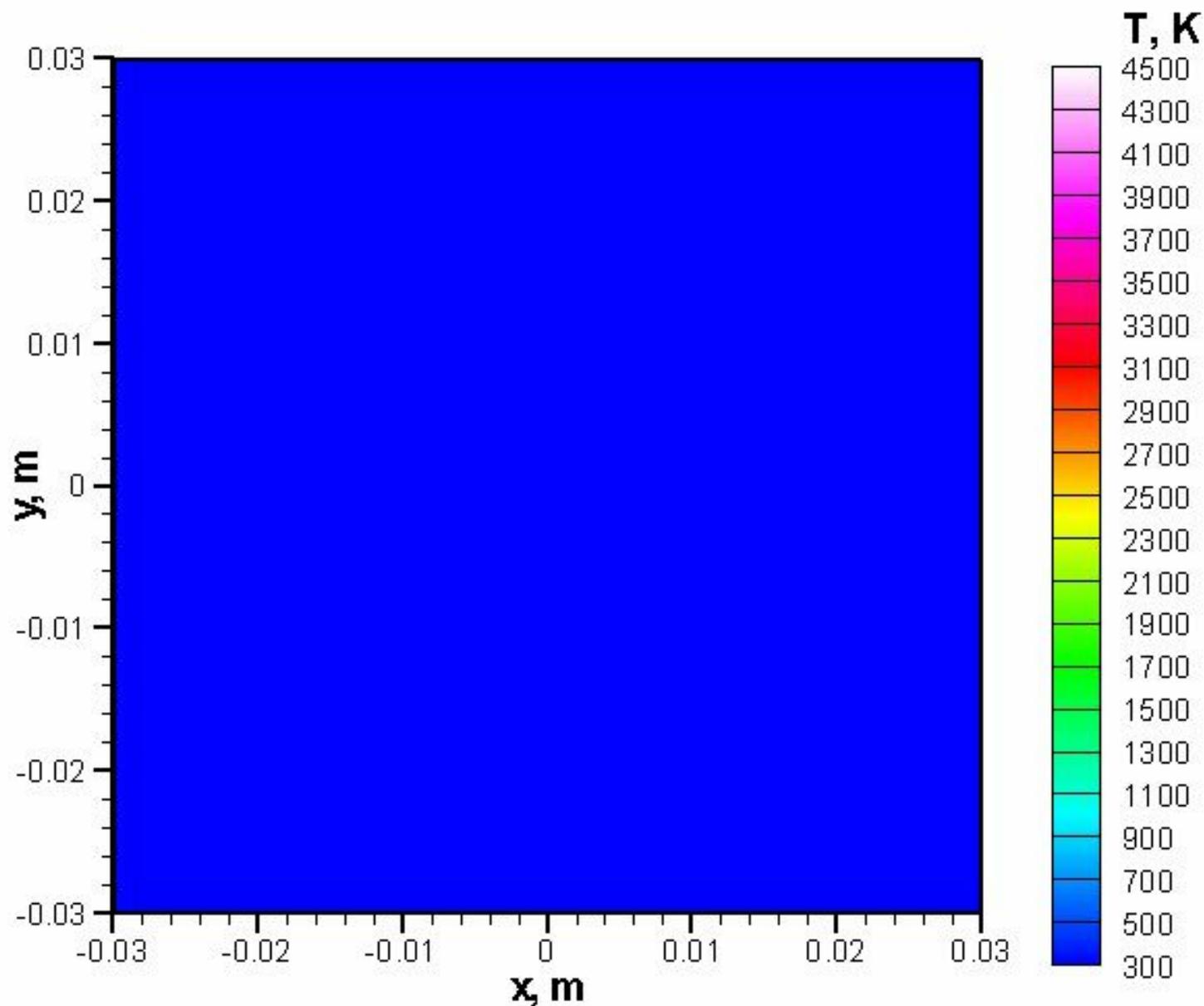


# Поле температуры при детонации в круговом цилиндре

з



# Детонация в квадратной камере изменяющегося по гармоническому закону размера

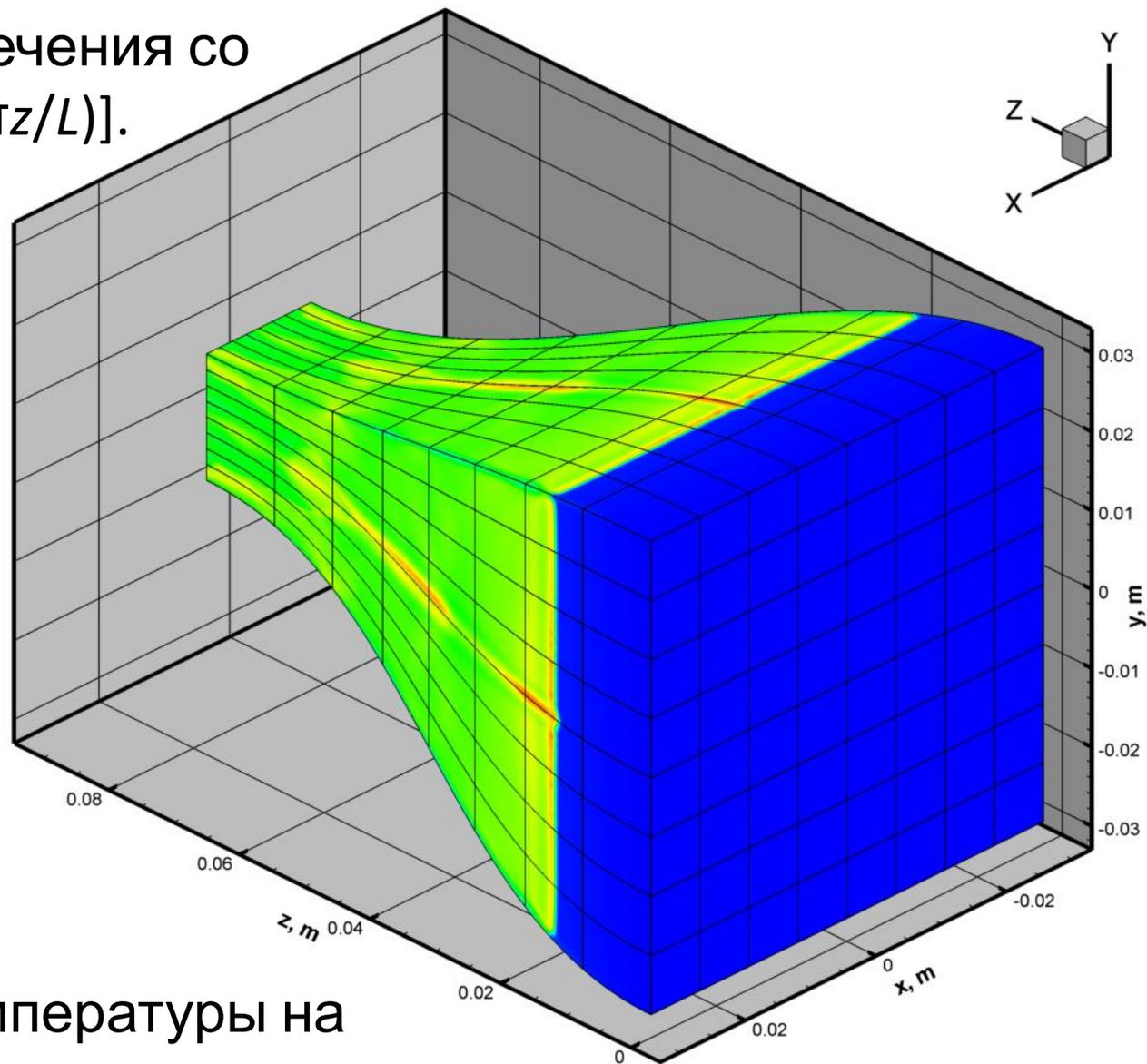


# Детонация в 3D каналах квадратного переменного сечения

Канал квадратного сечения со стороной  $h=H[1-\cos(\pi z/L)]$ .

$H=6$  см,  $L=9$  см.

При  $z=0$  задана сверхзвуковая скорость  $U=3000$  м/с.



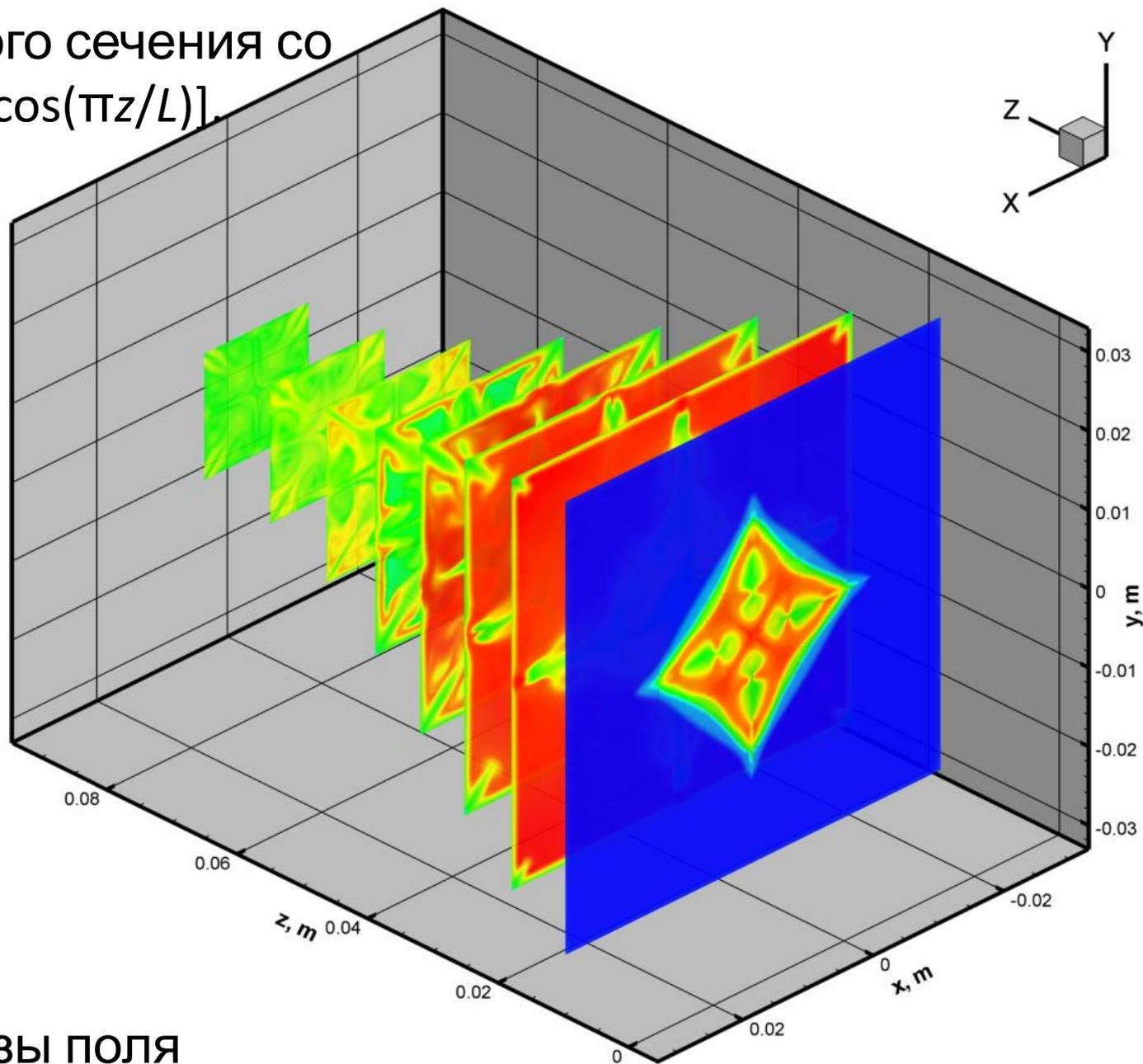
Поле температуры на поверхности

# Детонация в 3D каналах квадратного переменного сечения

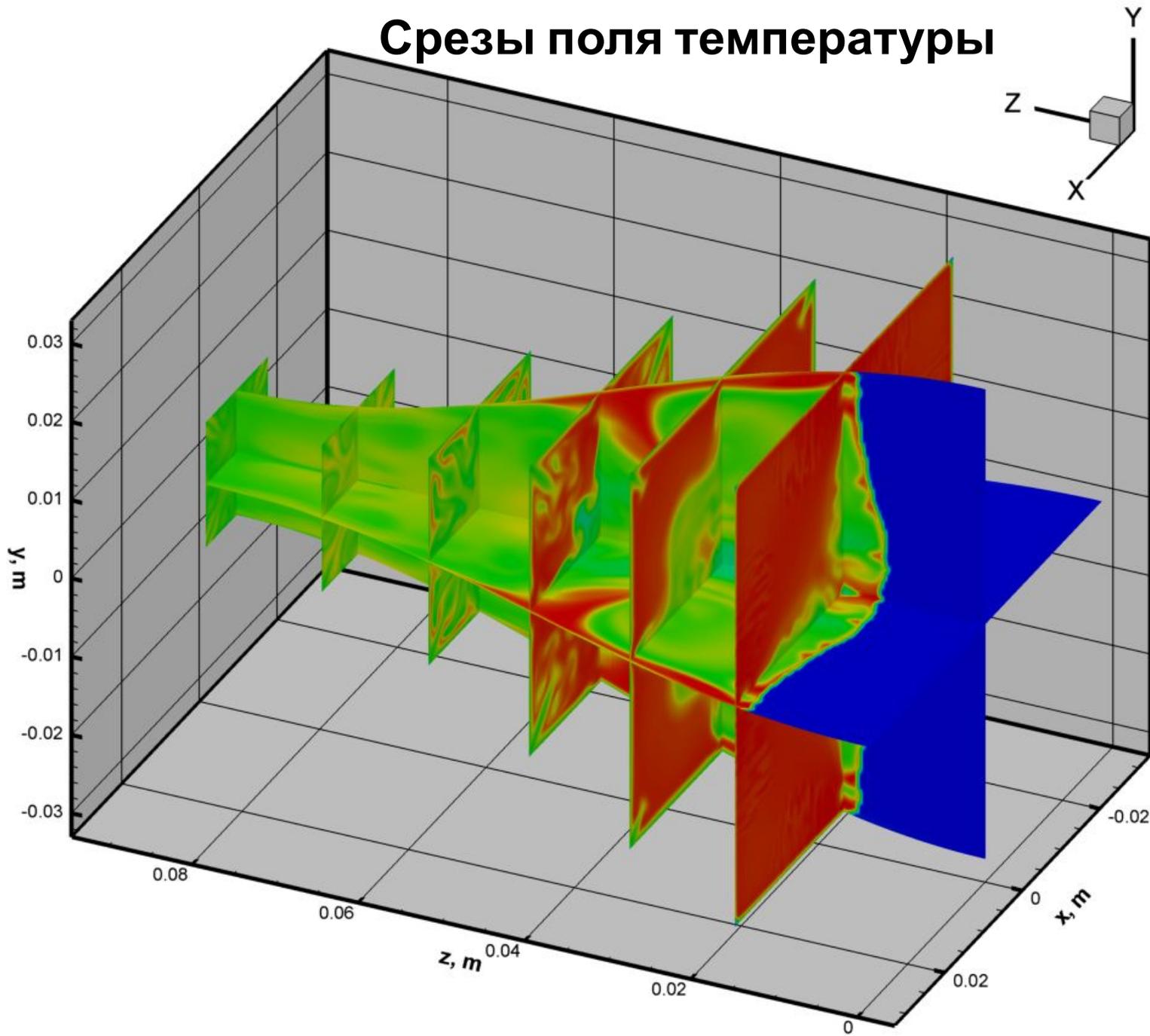
Канал квадратного сечения со стороной  $h=H[1-\cos(\pi z/L)]$ .

$H=6$  см,  $L=9$  см.

При  $z=0$  задана сверхзвуковая скорость  $U=3000$  м/с.



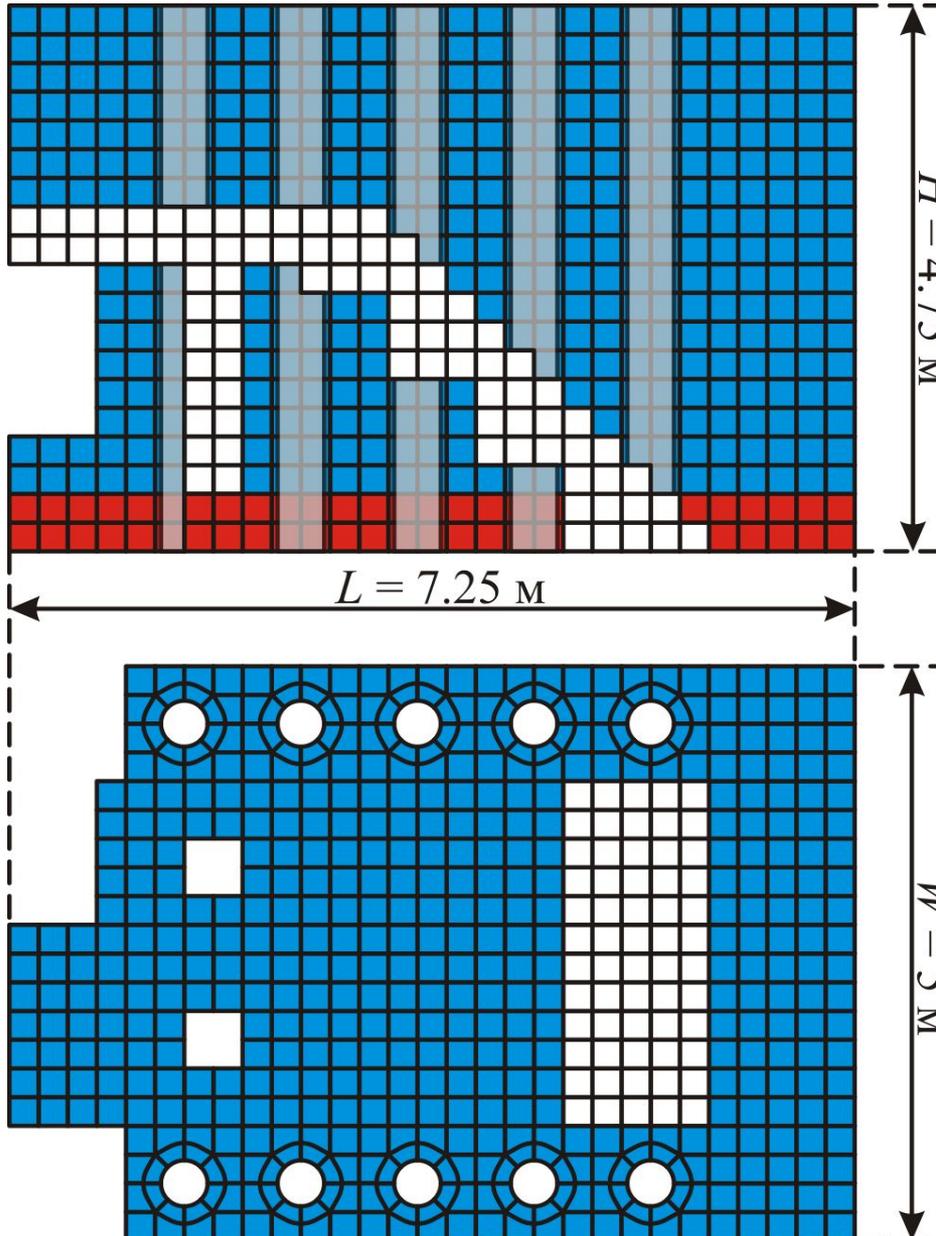
# Срезы поля температуры



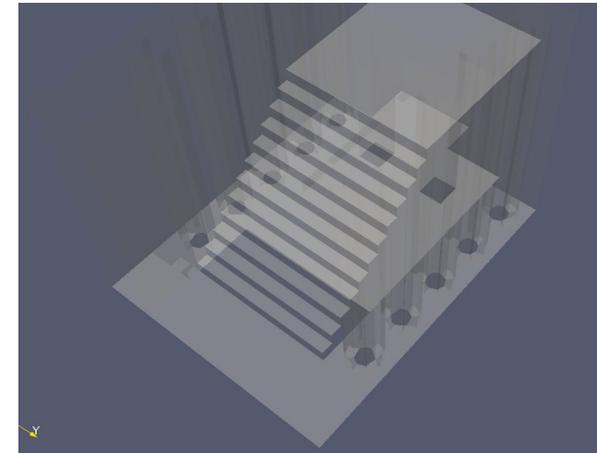
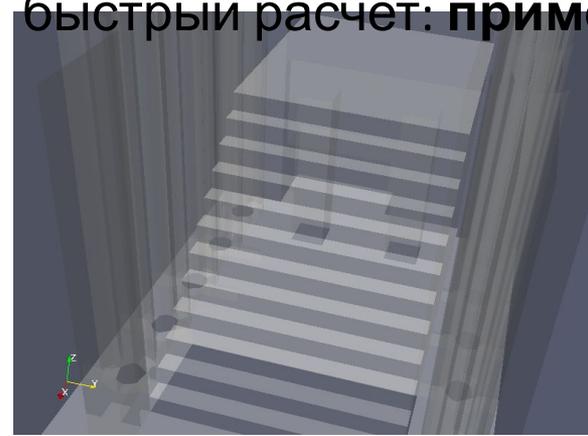
# Проведение расчетов на многоядерных процессорах, кластерах и суперкомпьютерах

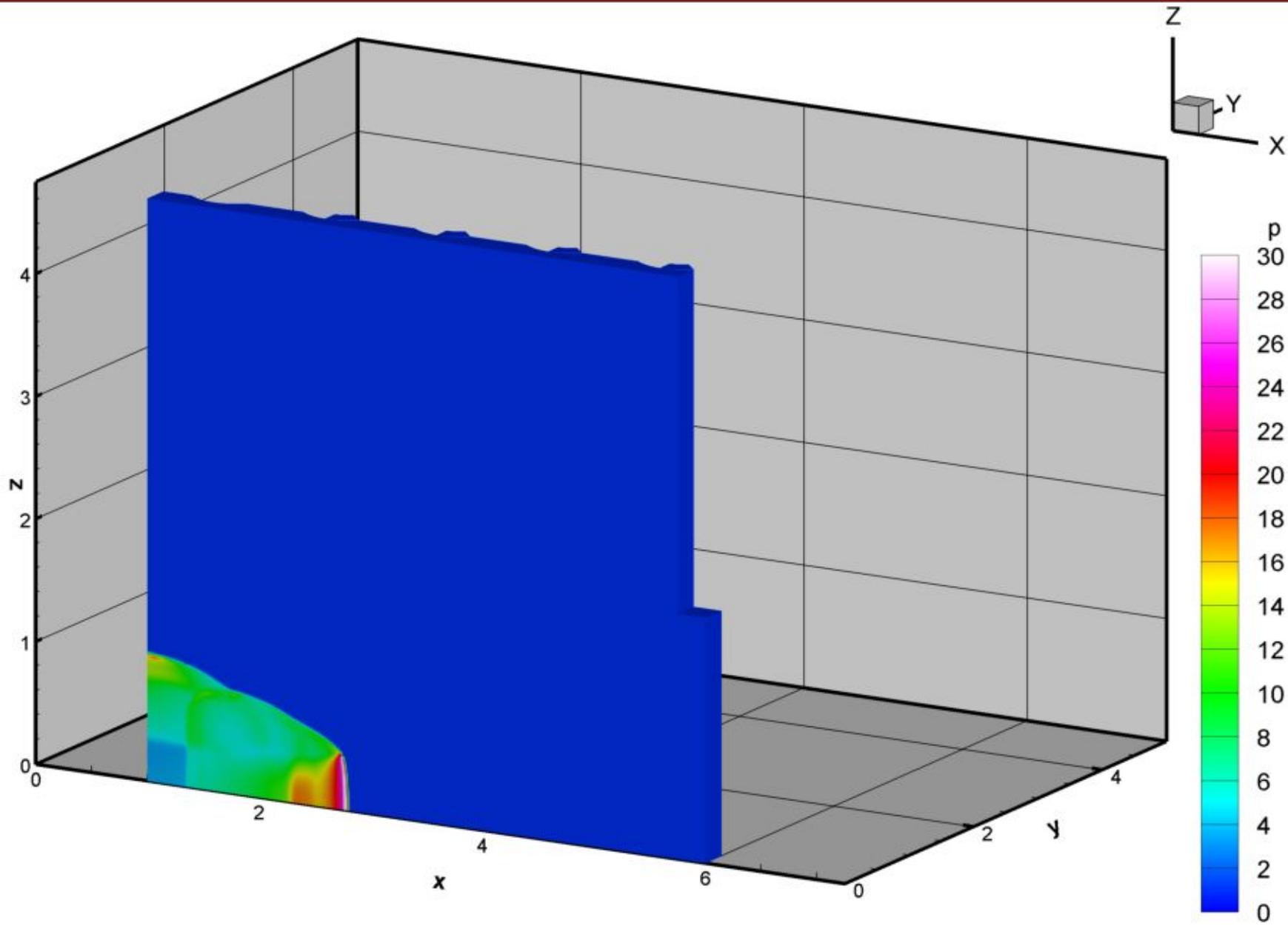
- В программе под Windows произведено **распараллеливание** расчета задач на все ядра **систем с общей памятью** – персональных компьютеров с одним процессором или многопроцессорных серверов.
- Проведено распараллеливание кода на основе **MPI для систем с распределенной памятью** – кластеров и суперкомпьютеров.
- Реализована возможность подготовки **любой** задачи к запуску на суперкомпьютер **нажатием одной кнопки** интерфейса пользователя
- Проведены расчеты на суперкомпьютере «Ломоносов» с числом процессорных ядер, равным **10000**, и с числом расчетных ячеек, достигающим **30 миллиардов**, в случаях, требующих обязательного распараллеливания (большой объем расчетной области)

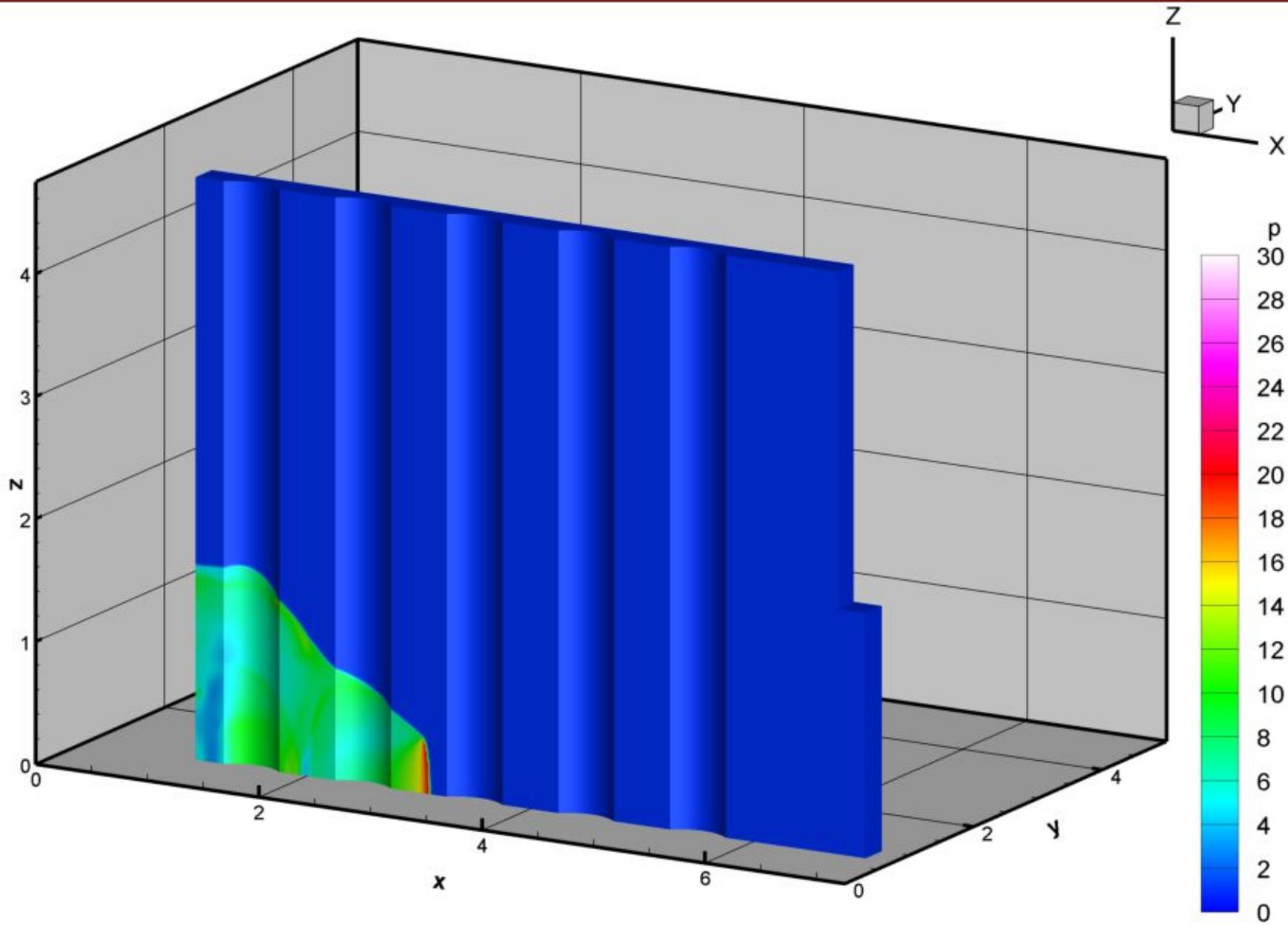
# Результаты расчетов на суперкомпьютере «Ломоносов» взрыва в комнате с колоннами и

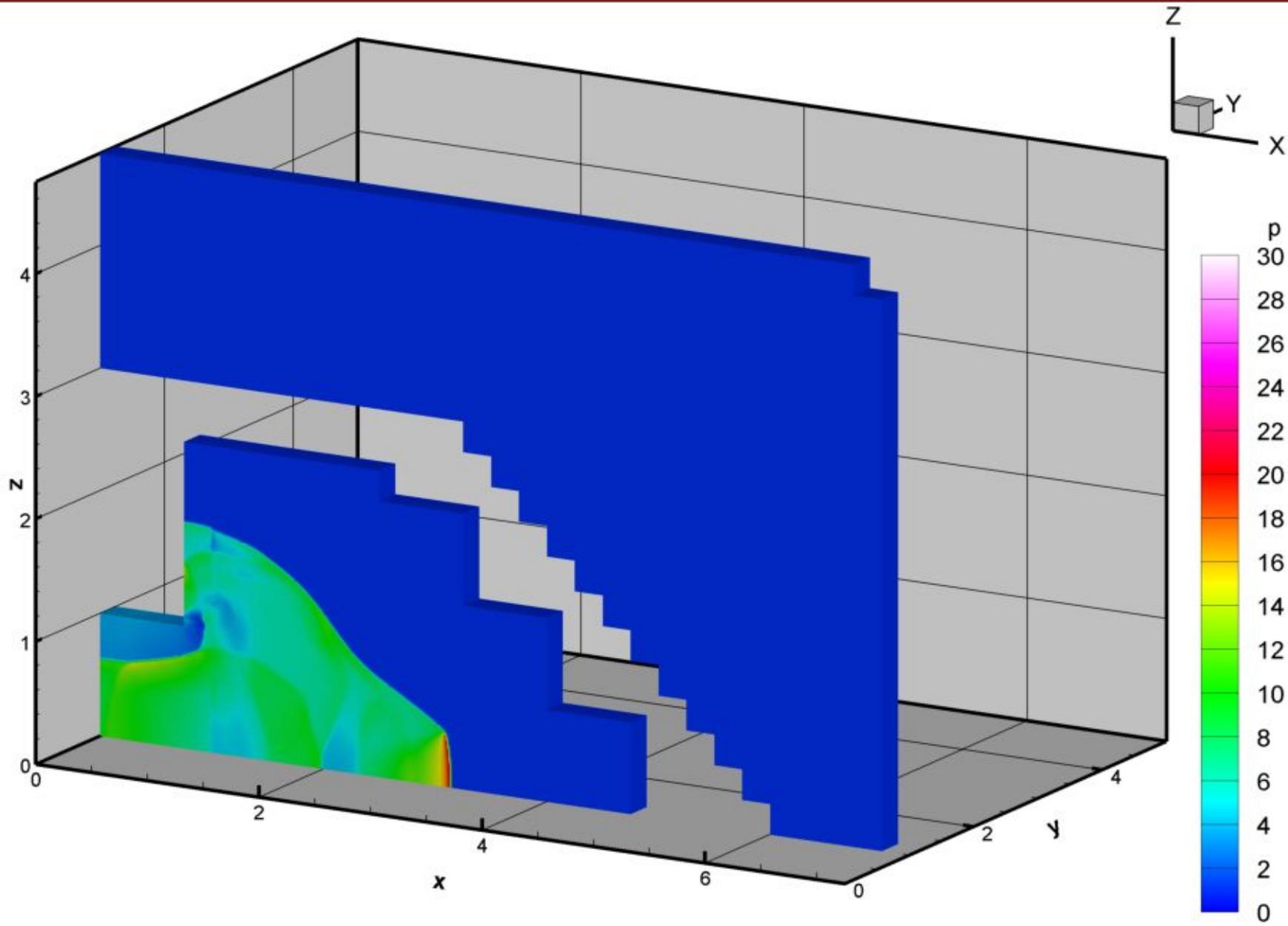


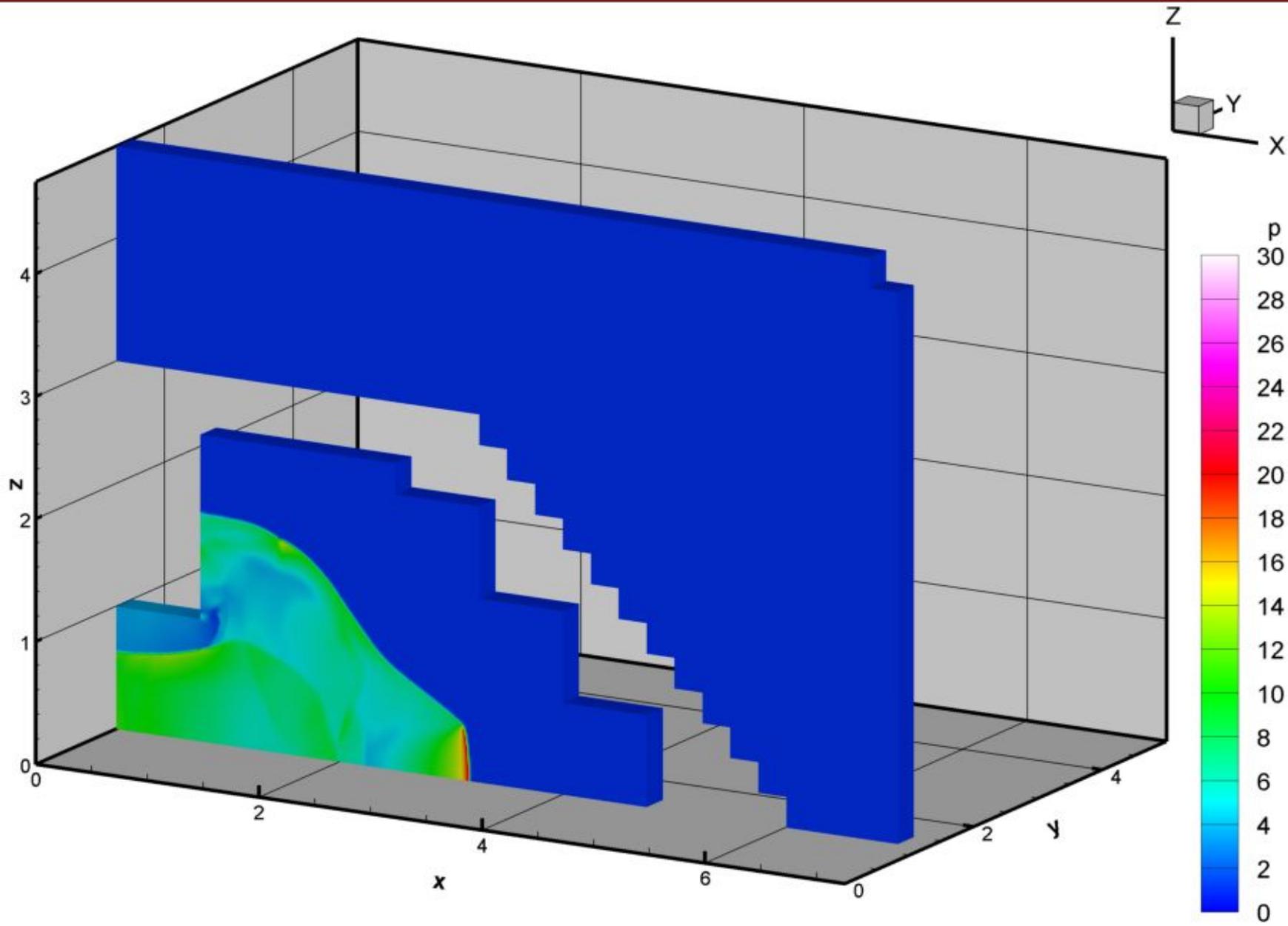
**ицей** 10000 расчетных блоков,  
практически линейное  
распараллеливание на **10000 ядер**,  
 $10000 \times 100 \times 100 \times 100 =$   
**10 000 000 000 ячеек**,  
быстрый расчет: **примерно 1 сутки**

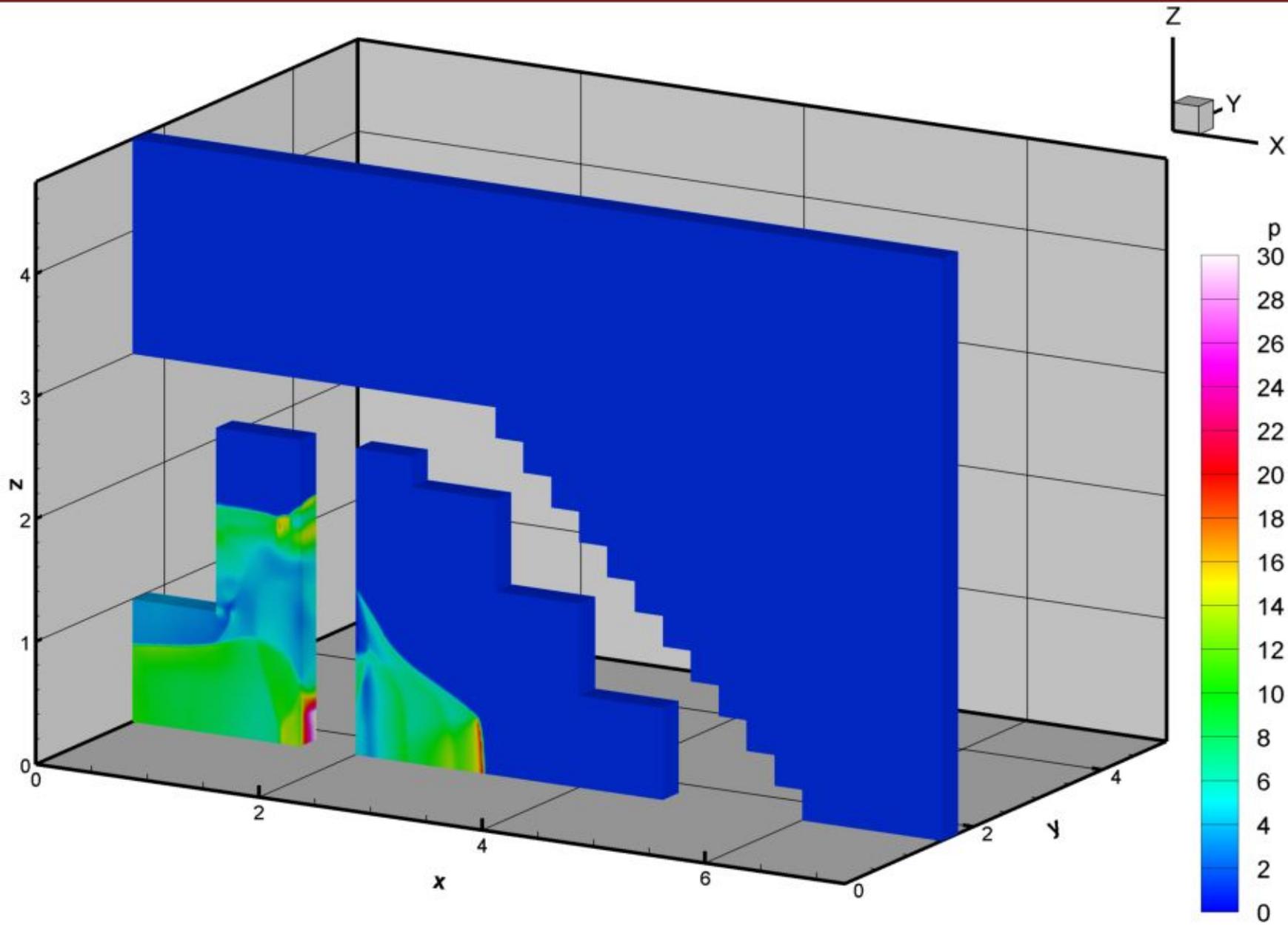


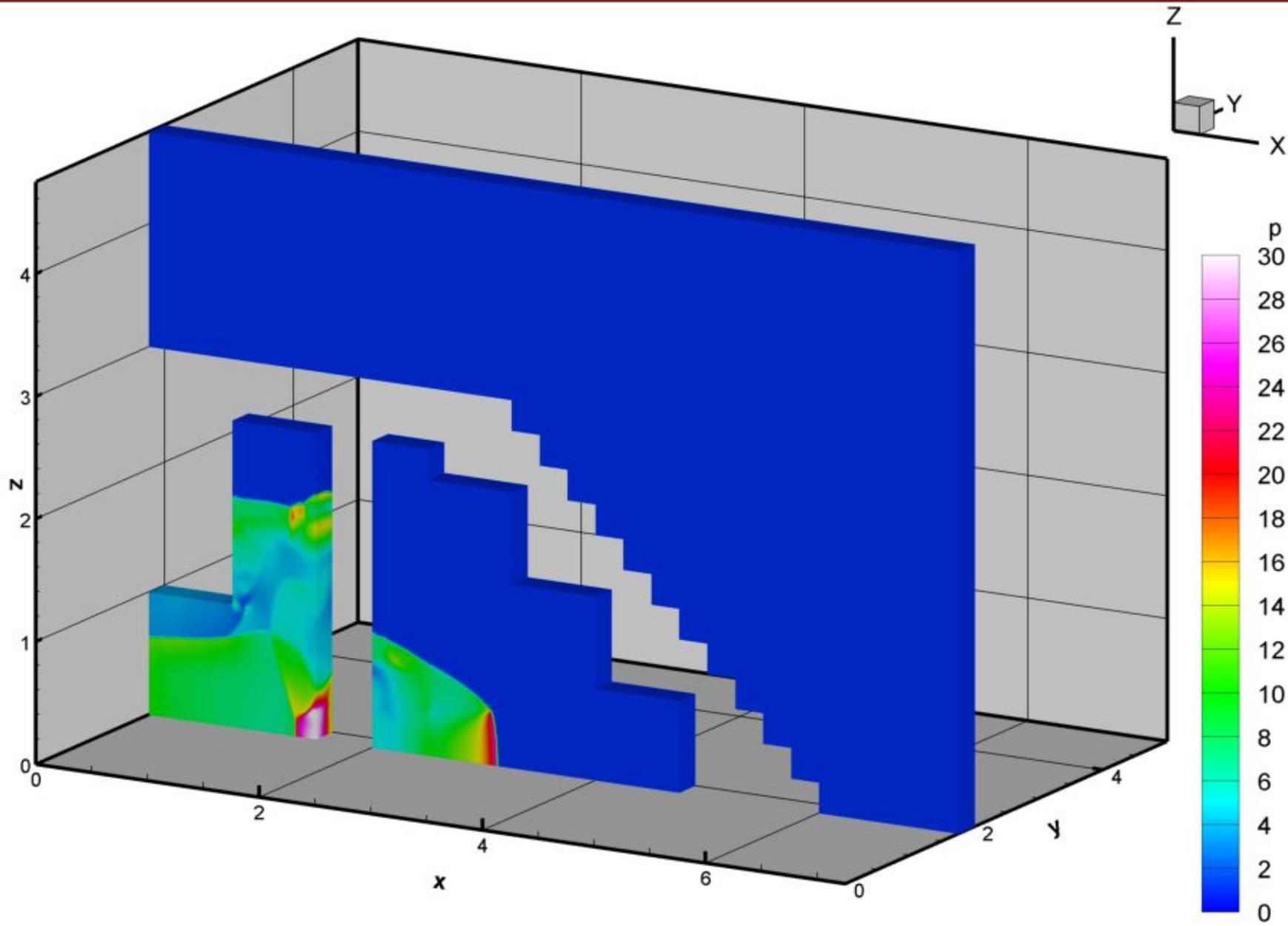


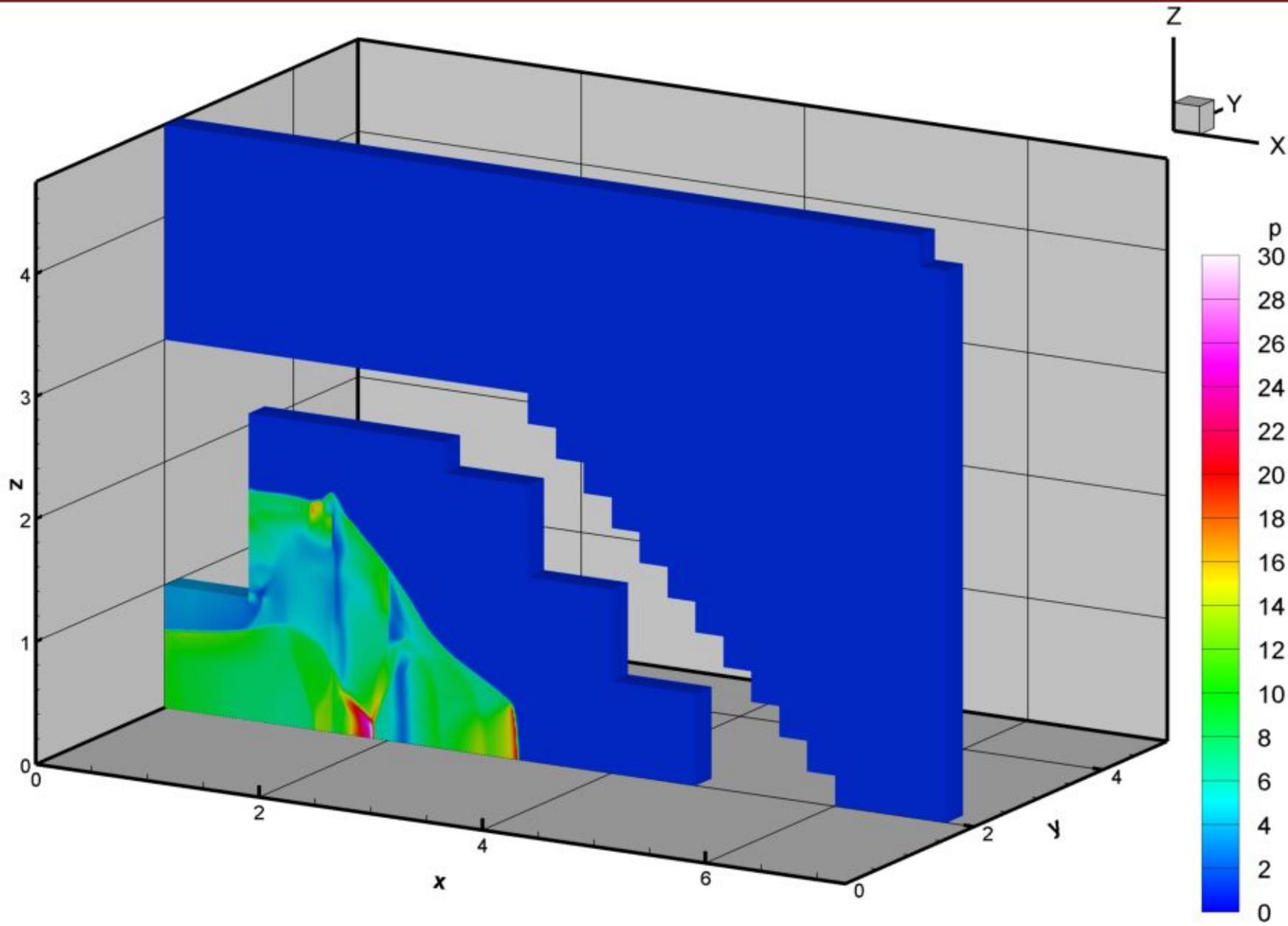


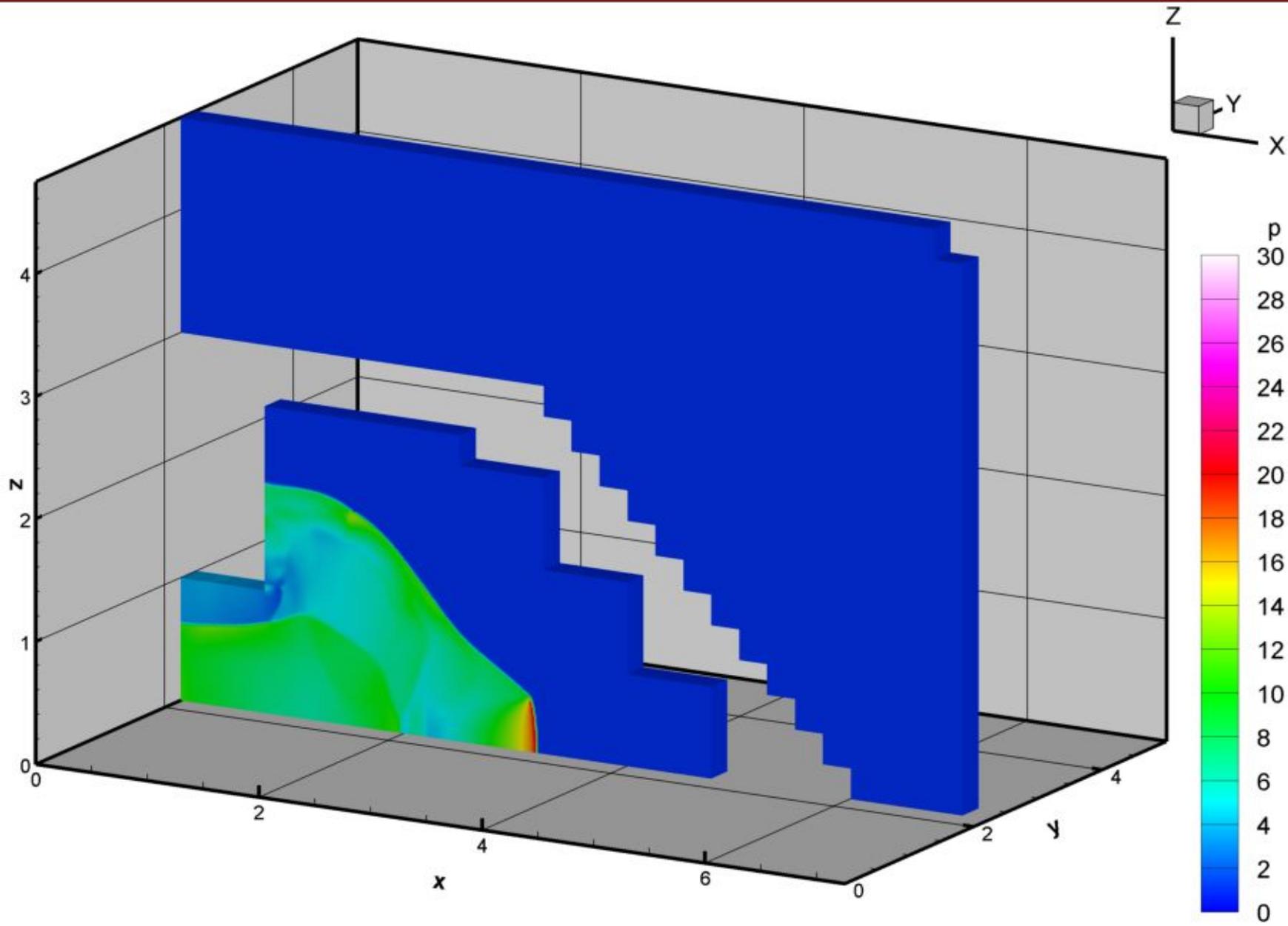




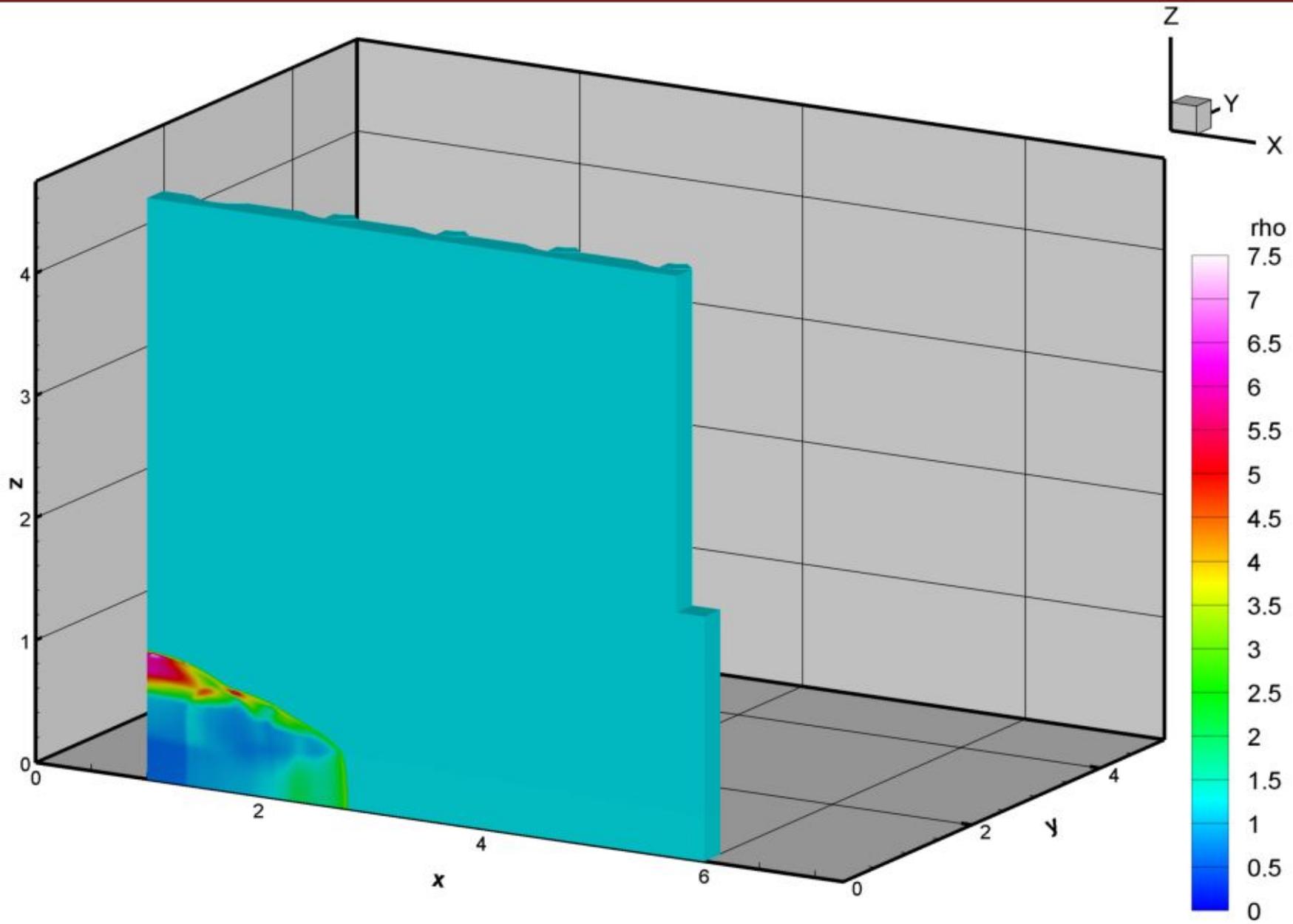




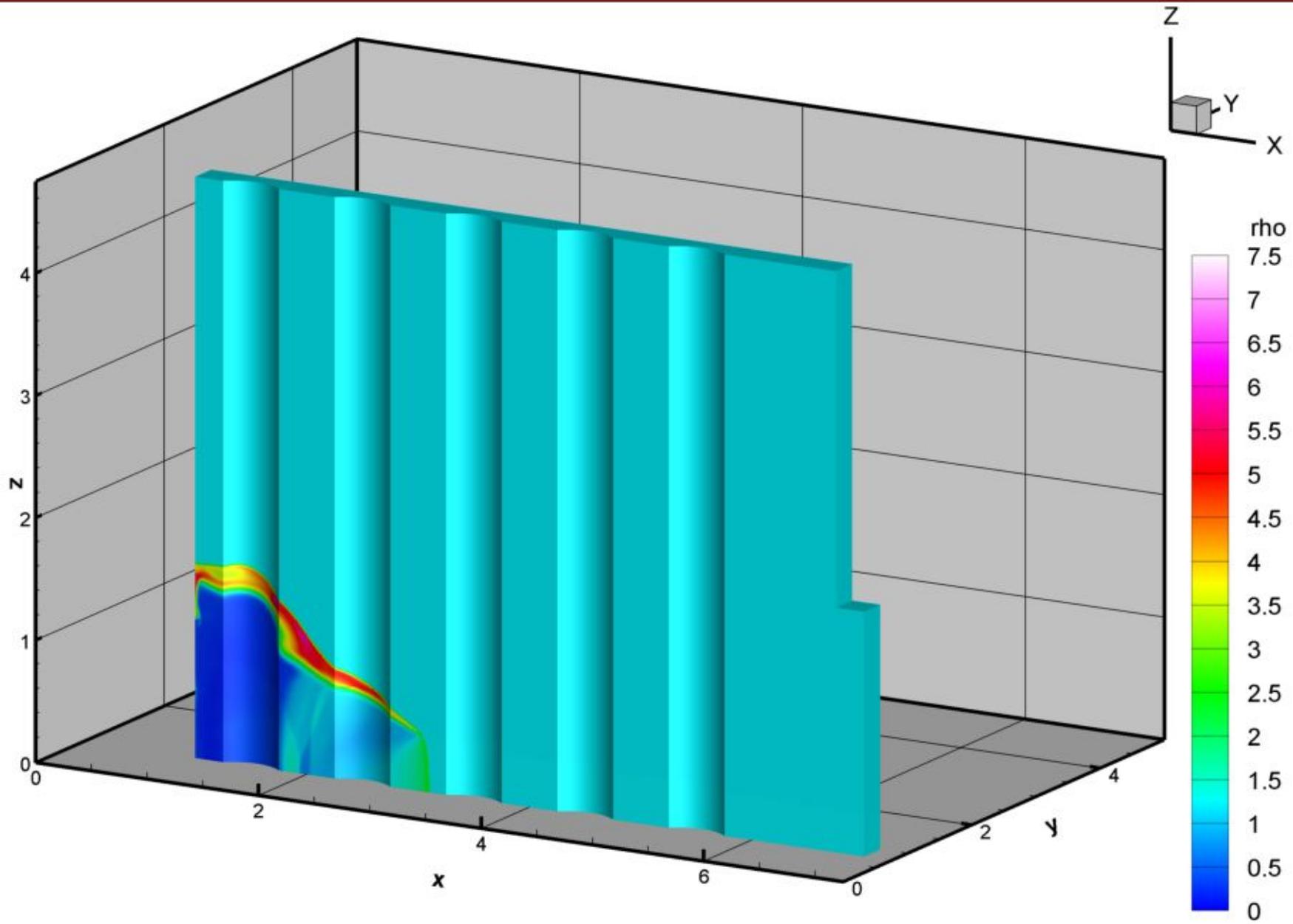




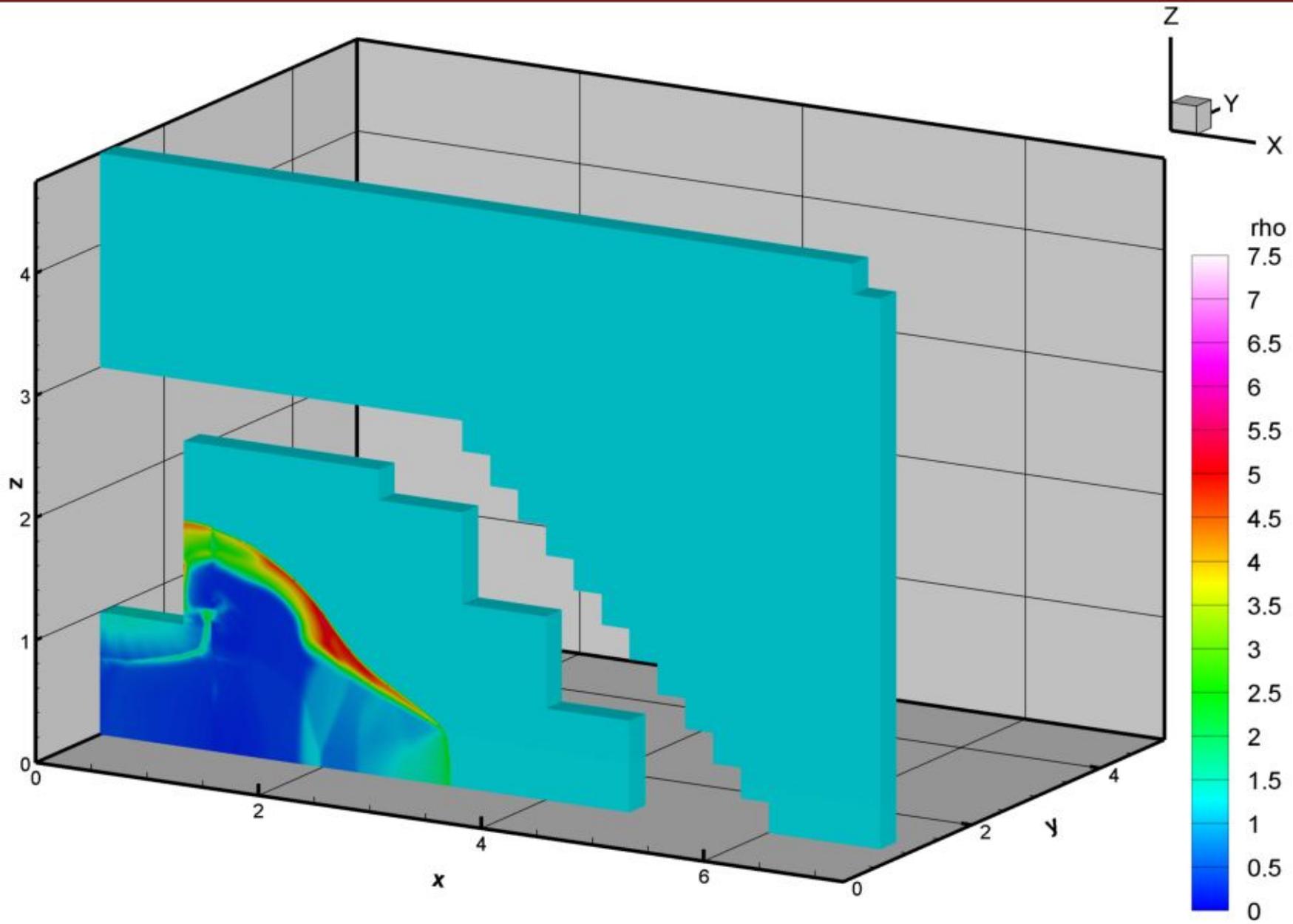
rho | t=0.0011644043241



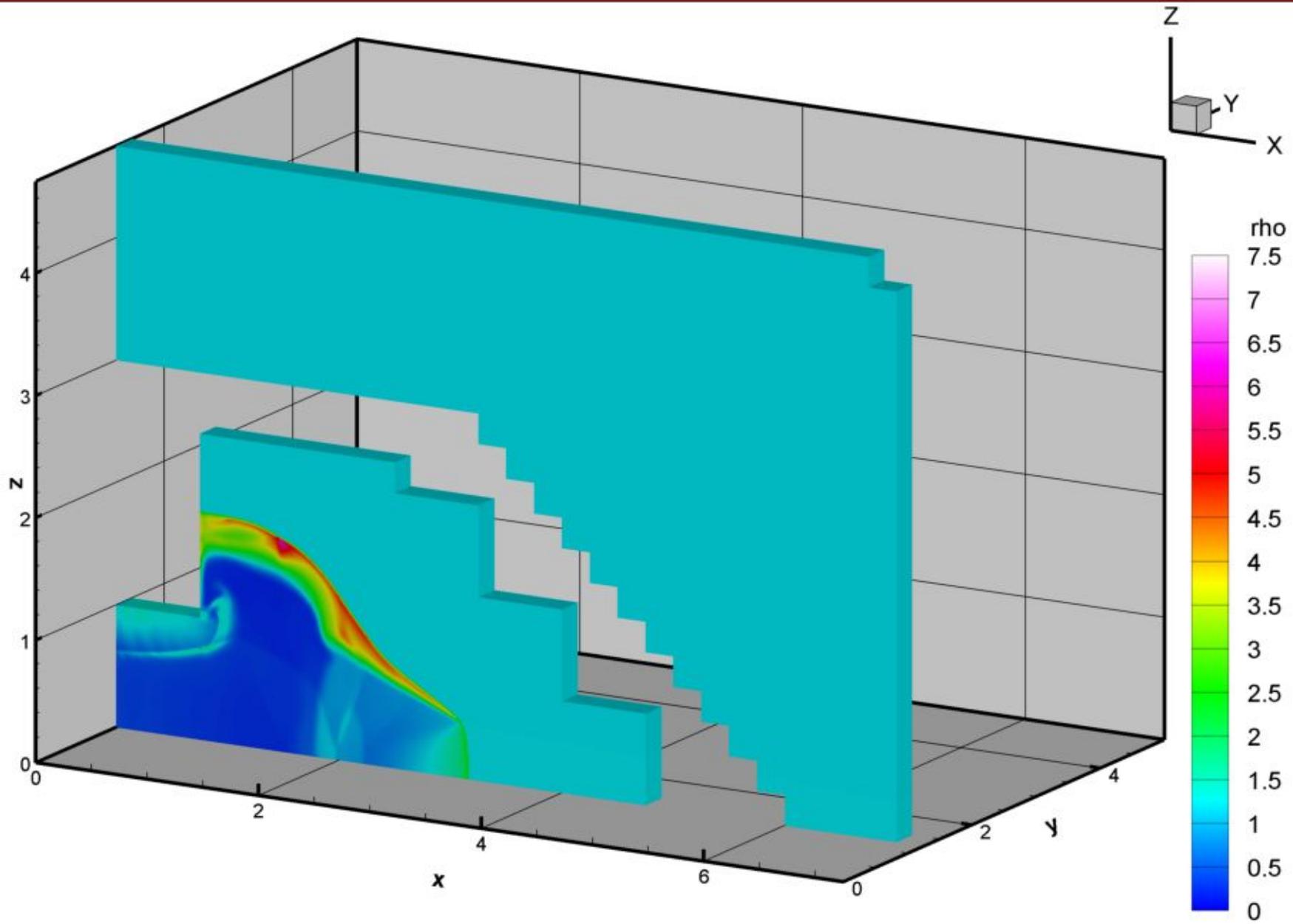
rho | t=0.0011644043241



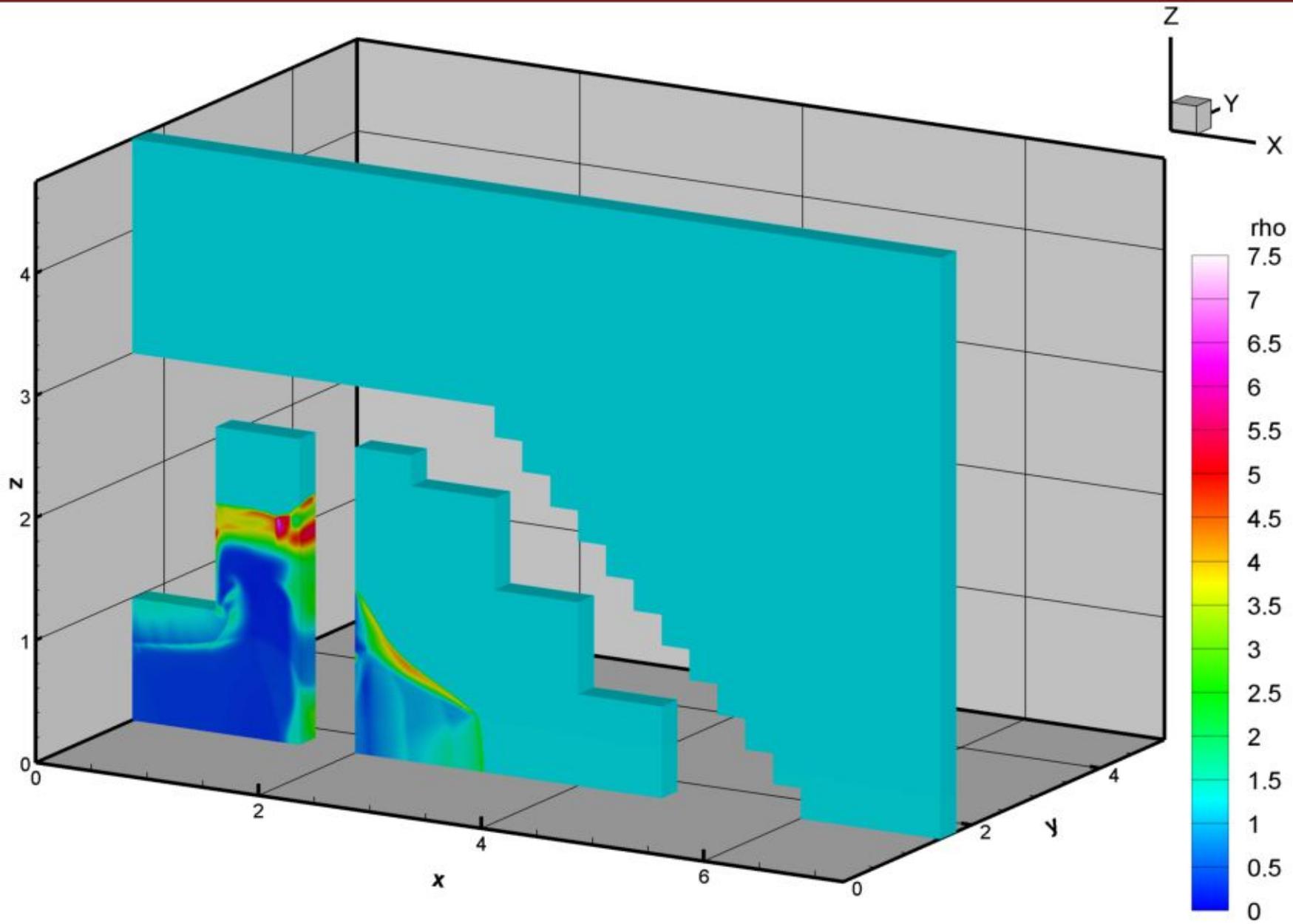
rho | t=0.0011644043241



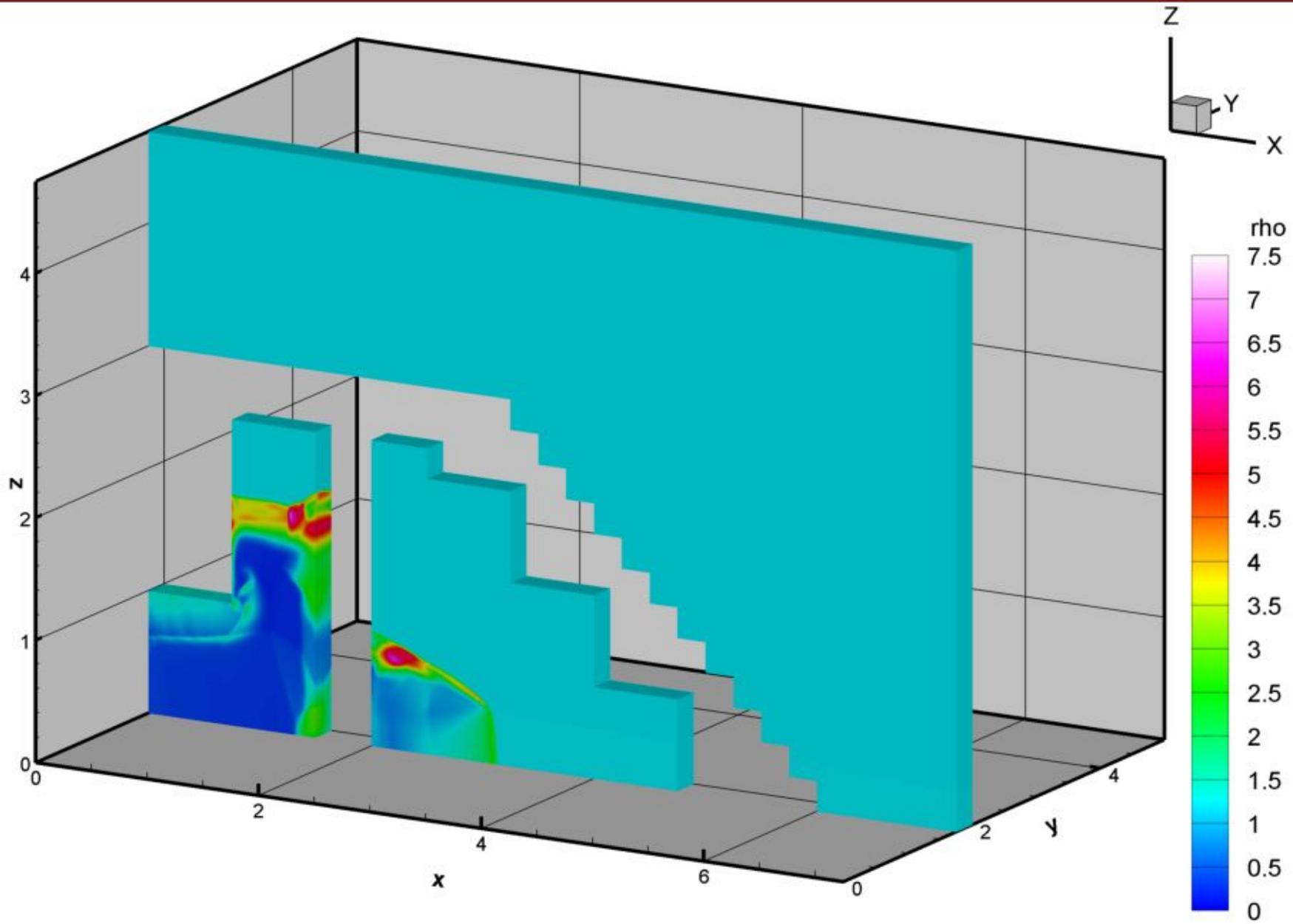
rho | t=0.0011644043241



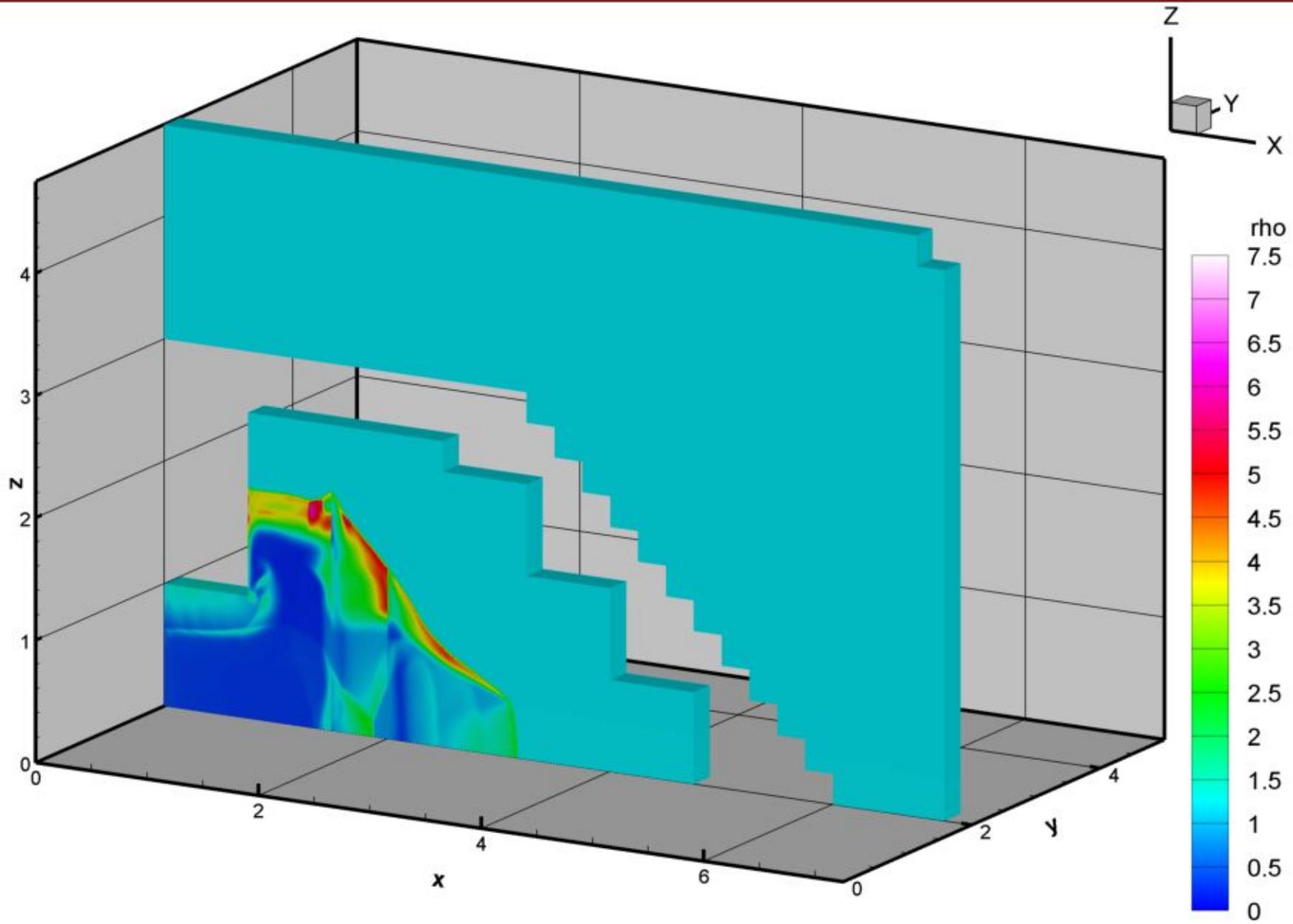
rho | t=0.0011644043241



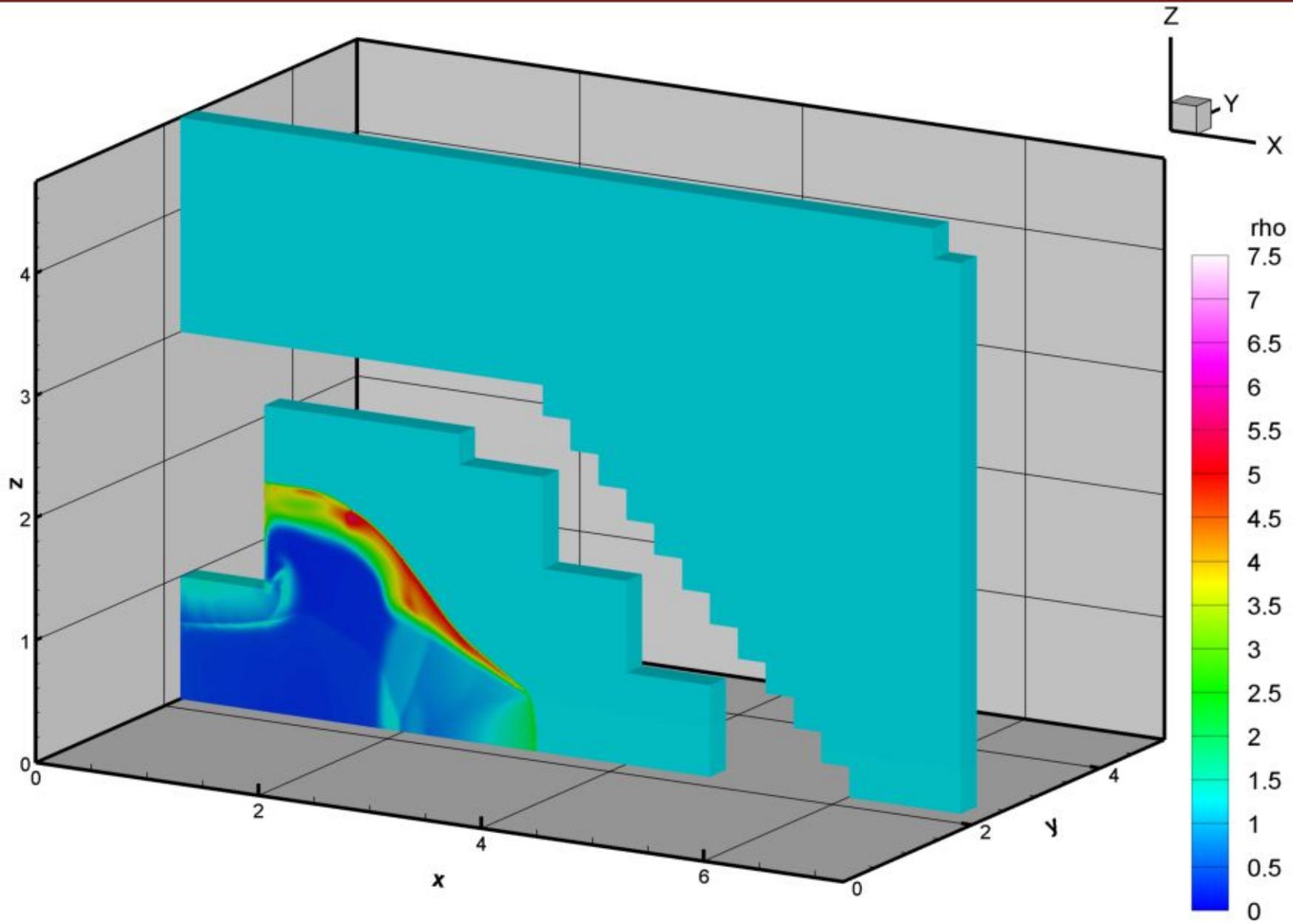
$\rho$  |  $t=0.0011644043241$



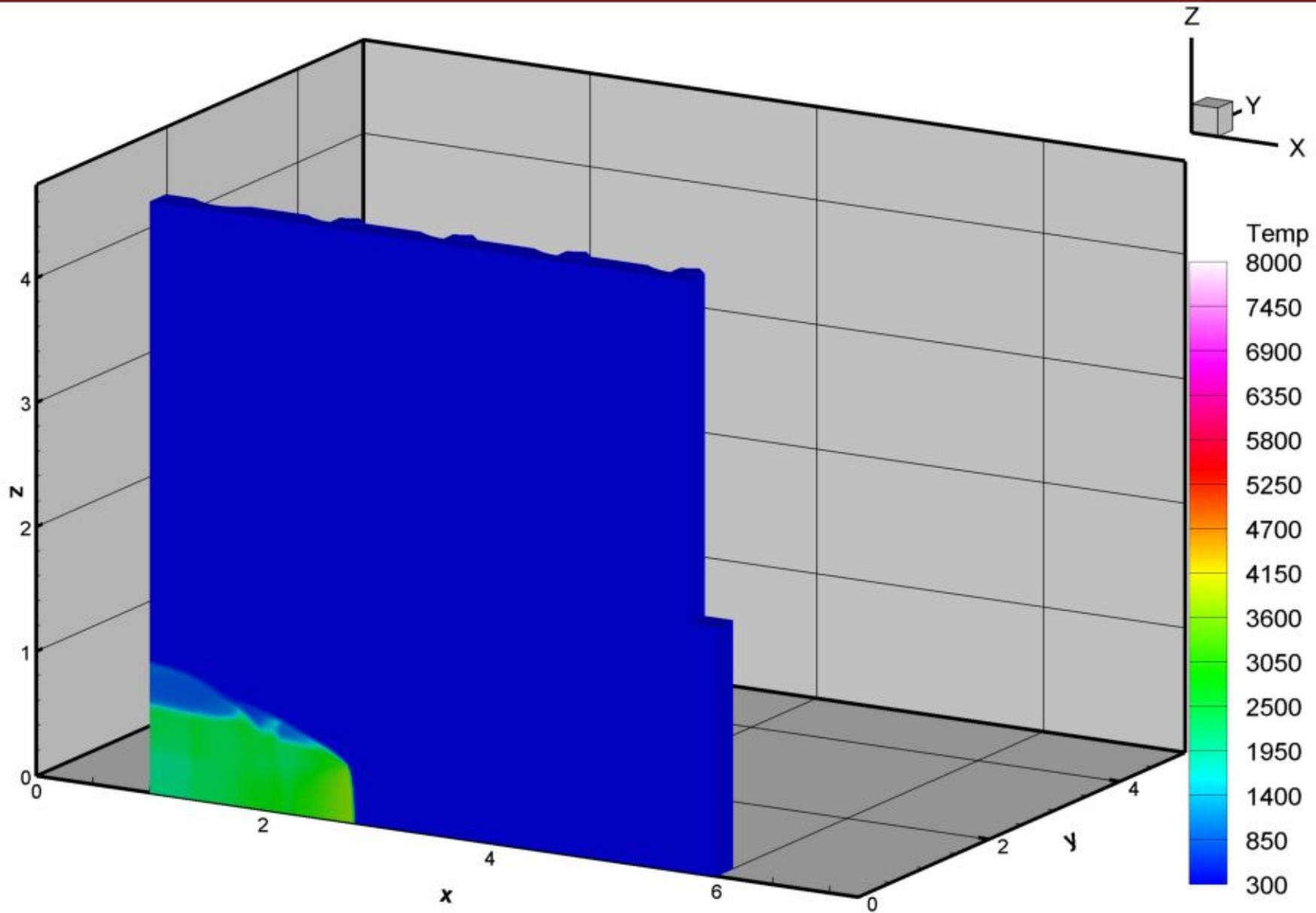
$\rho$  |  $t=0.0011644043241$



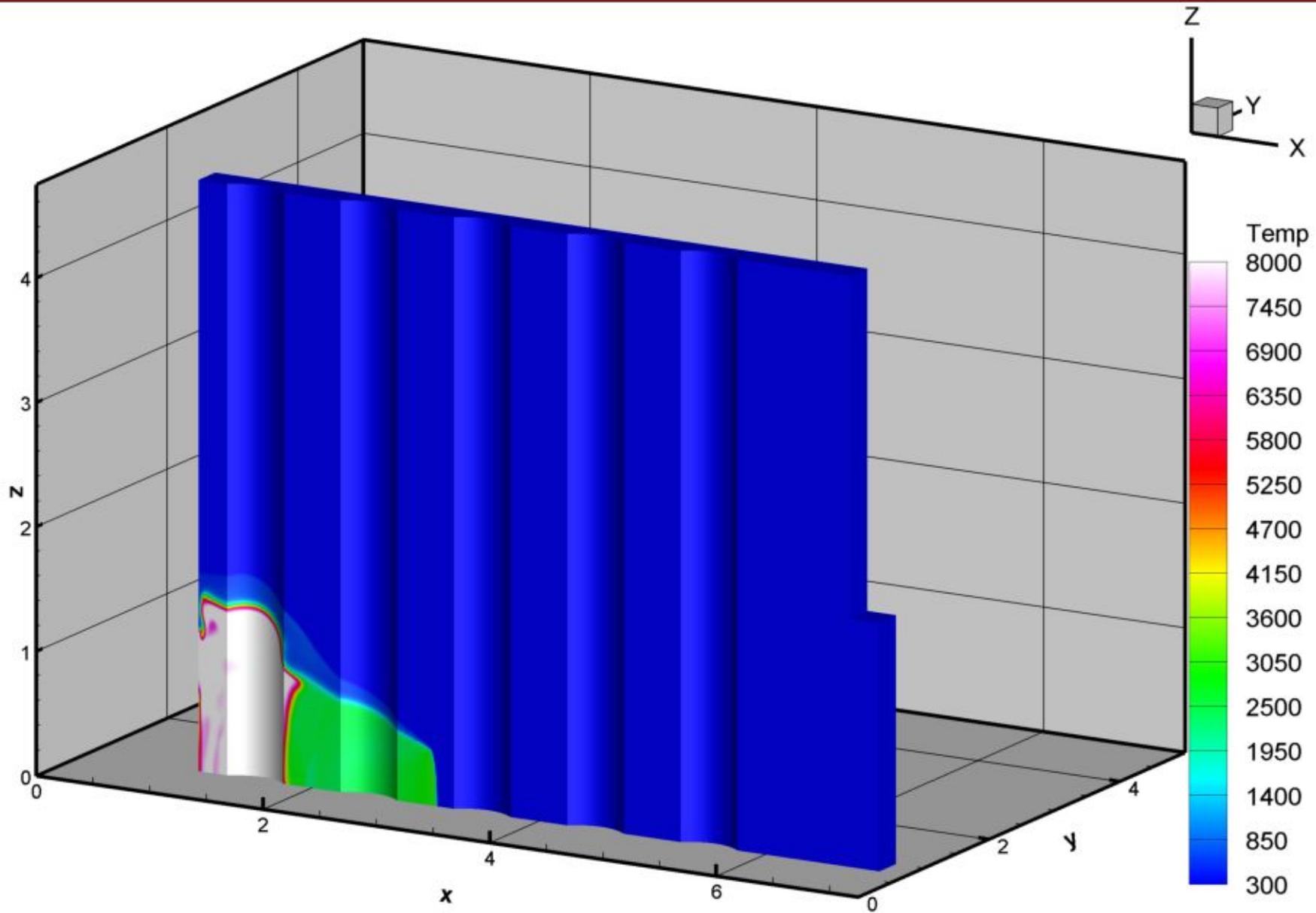
$\rho$  |  $t=0.0011644043241$



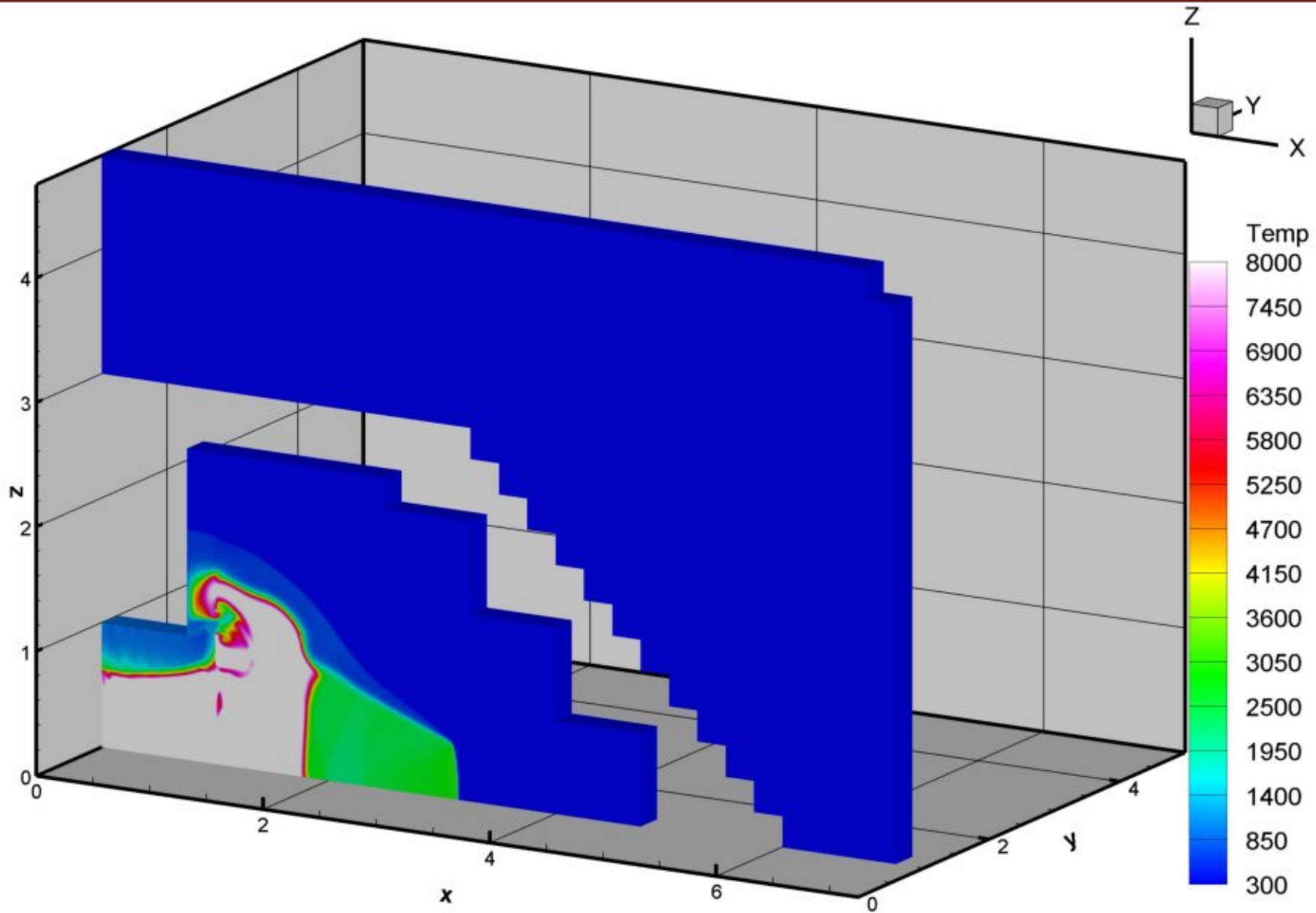
T, K | t=0.0011644043241



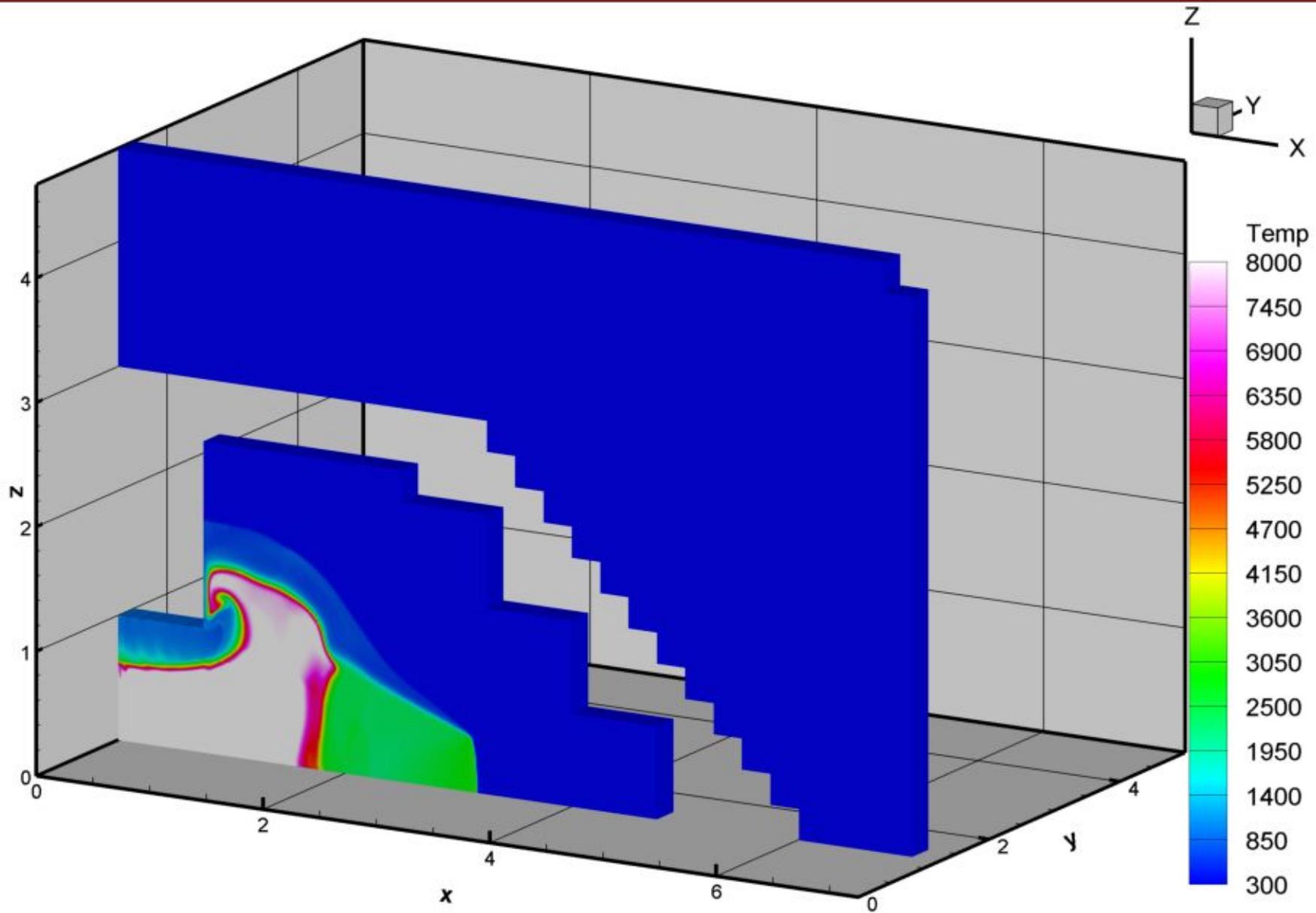
T, K | t=0.0011644043241



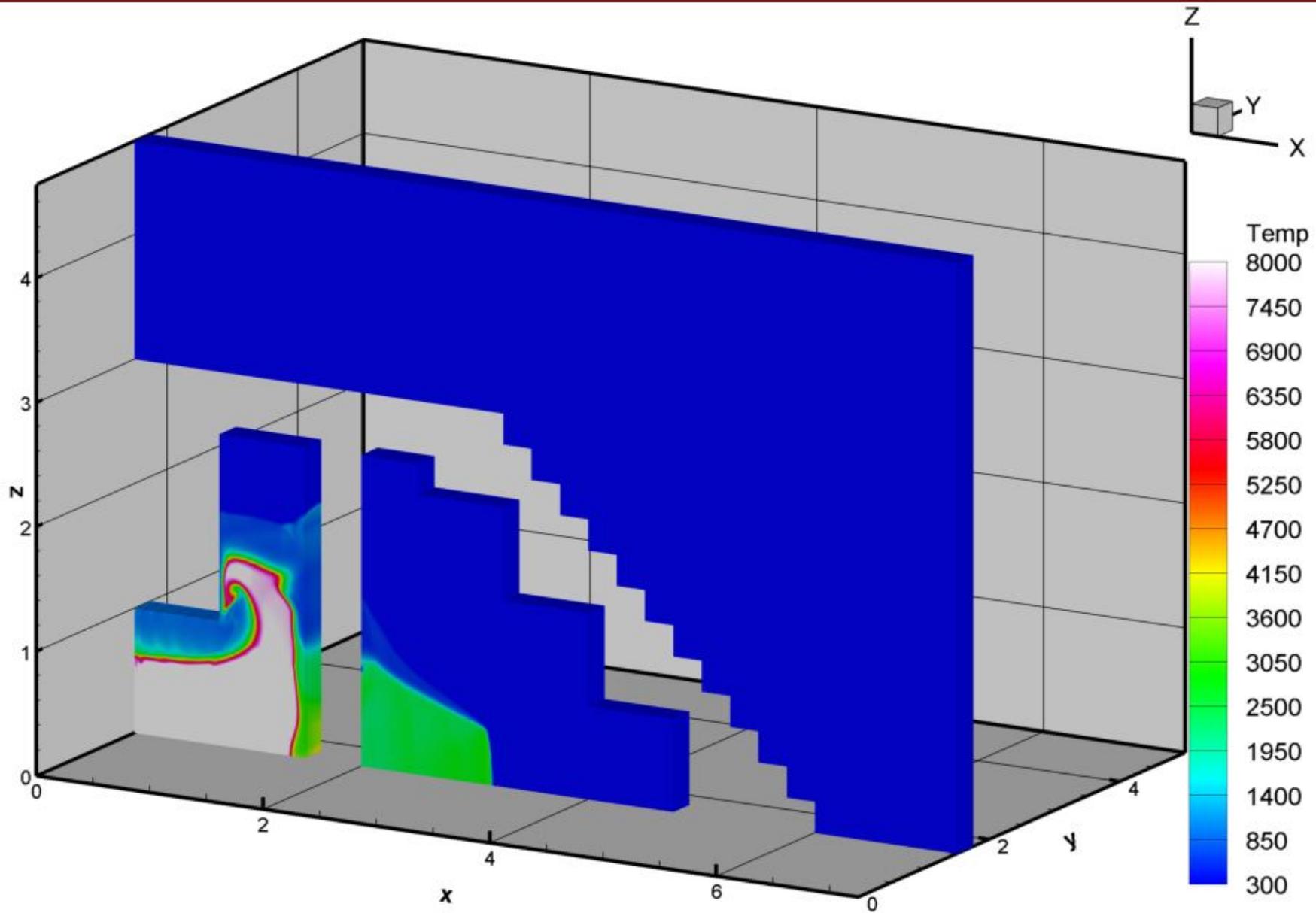
T, K | t=0.0011644043241



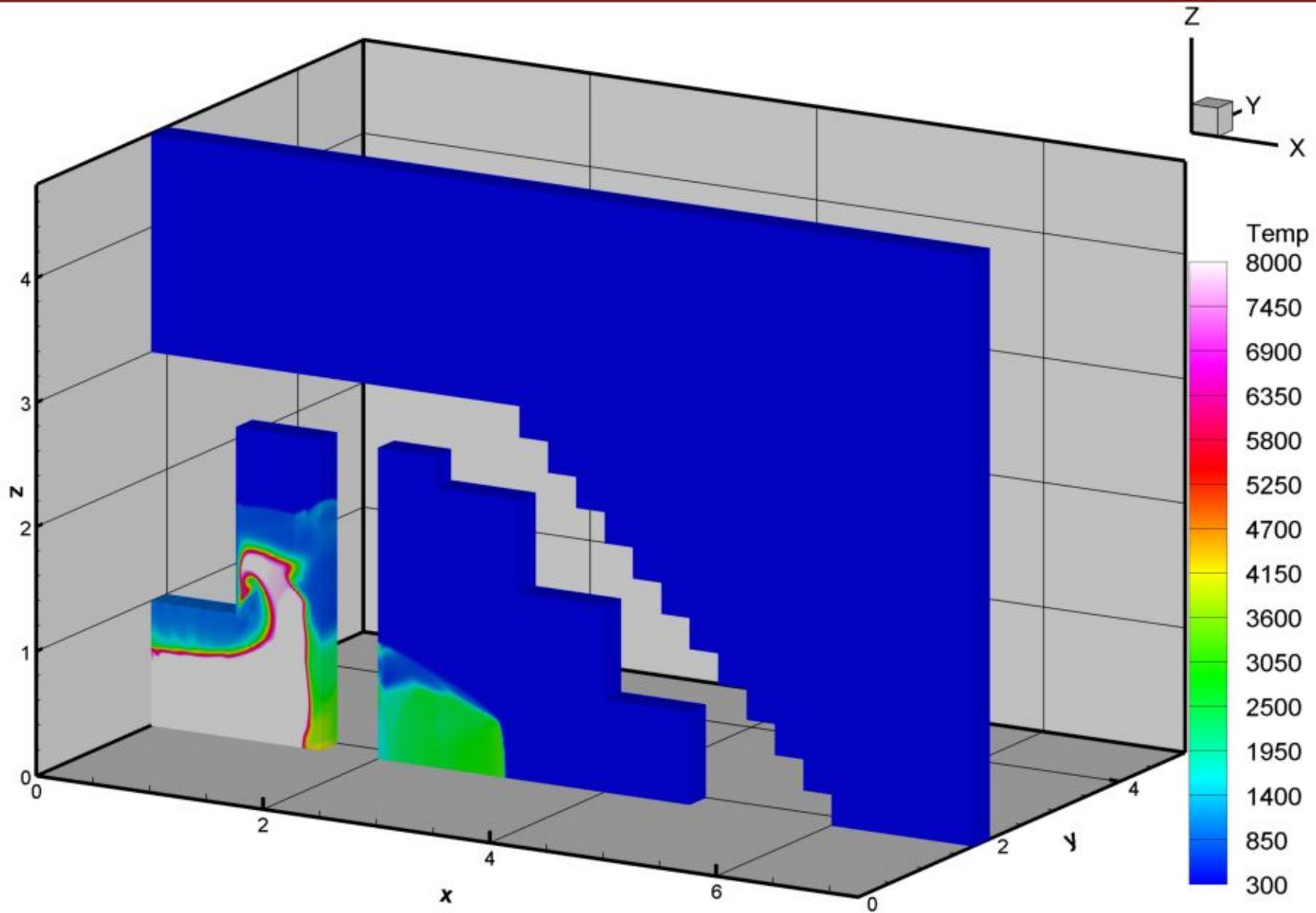
T, K | t=0.0011644043241



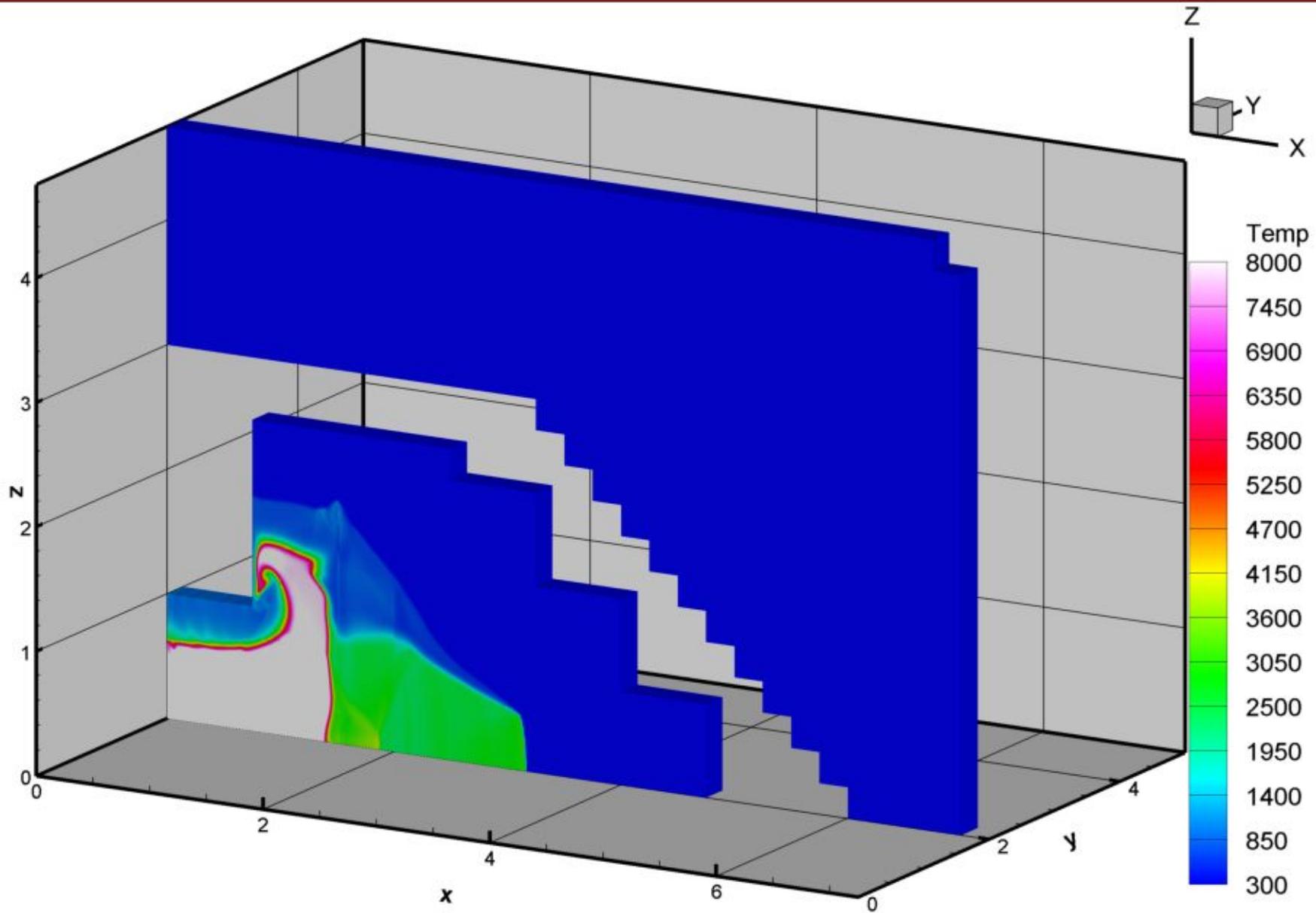
T, K | t=0.0011644043241



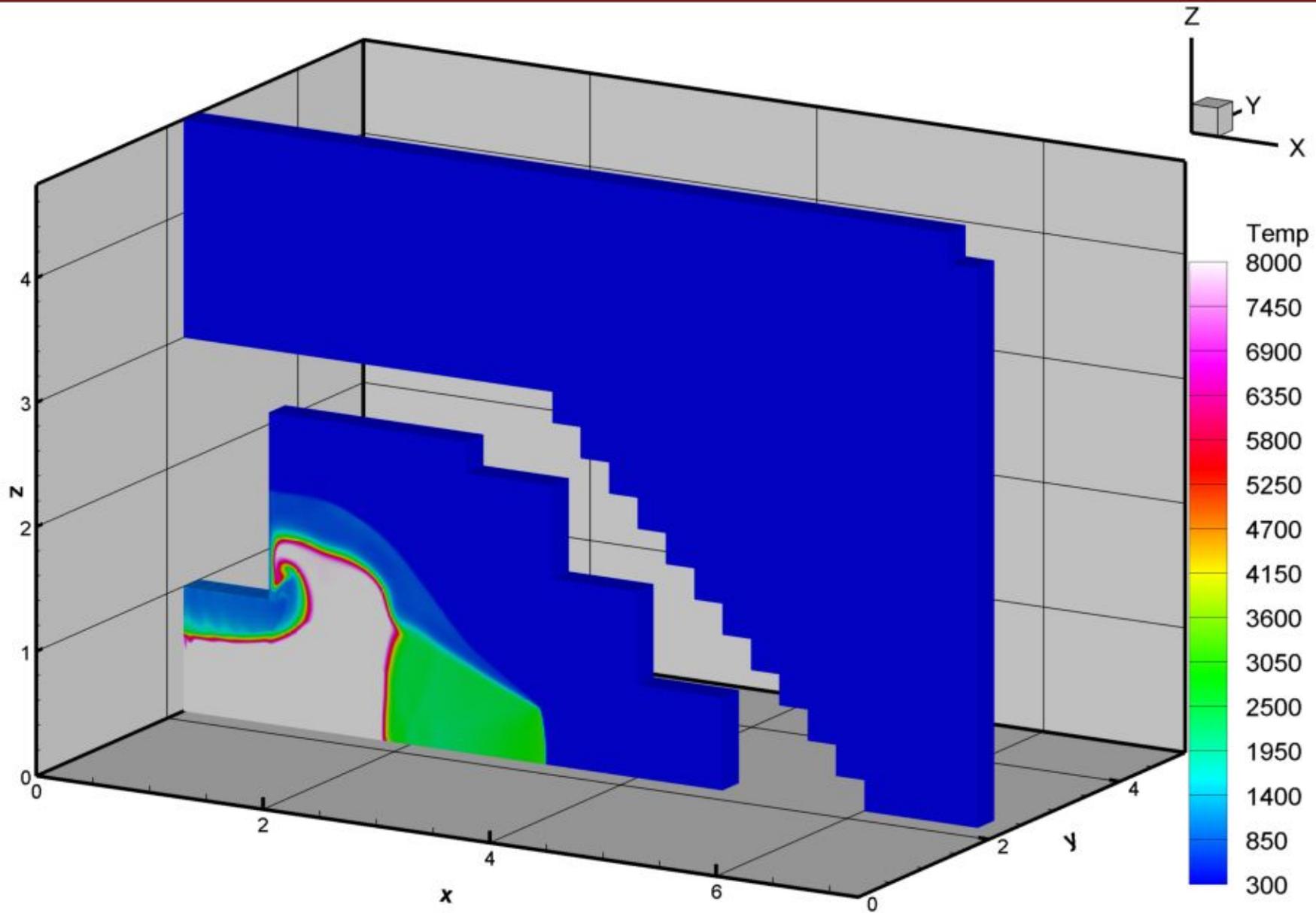
T, K | t=0.0011644043241



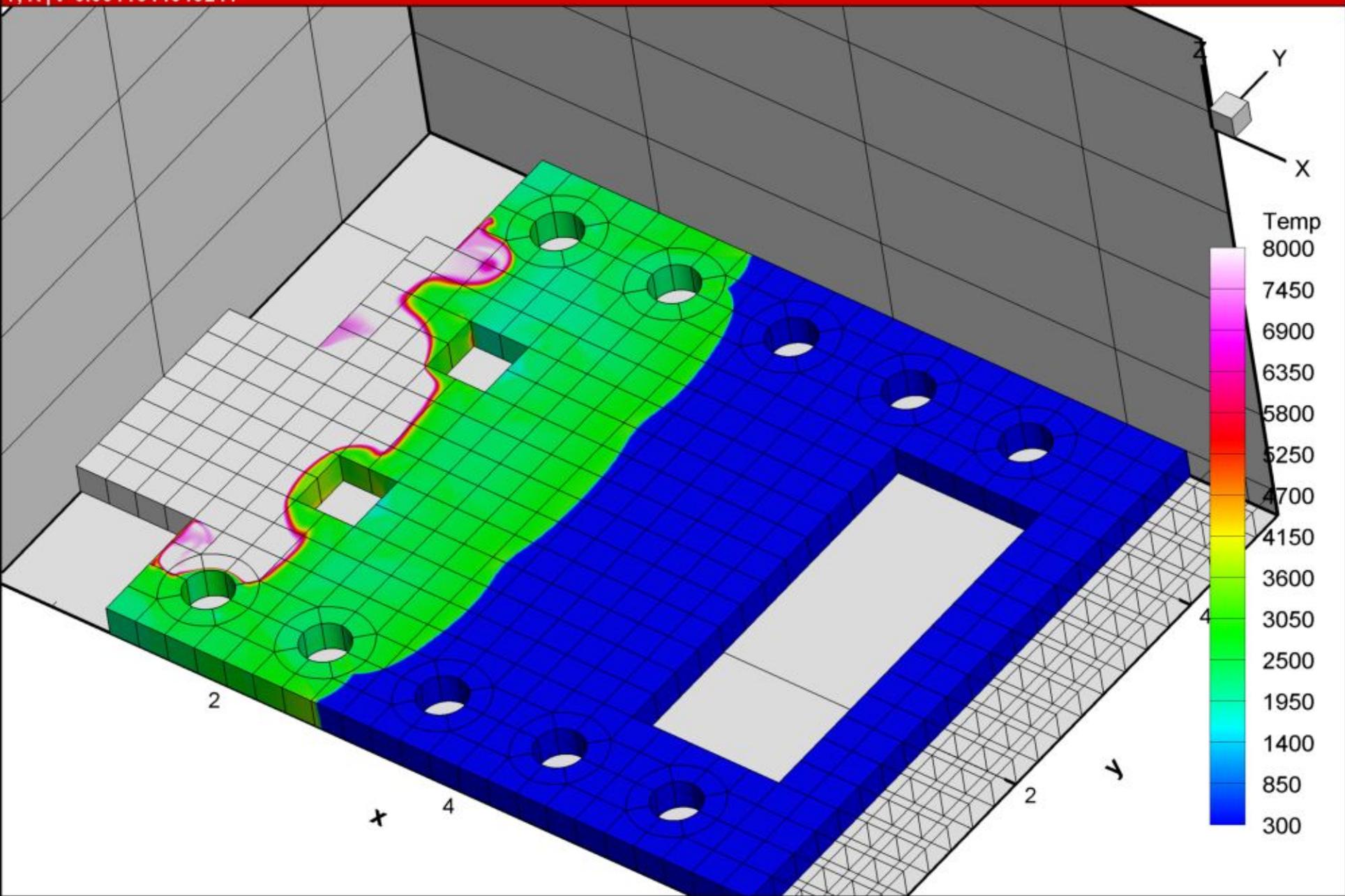
T, K | t=0.0011644043241



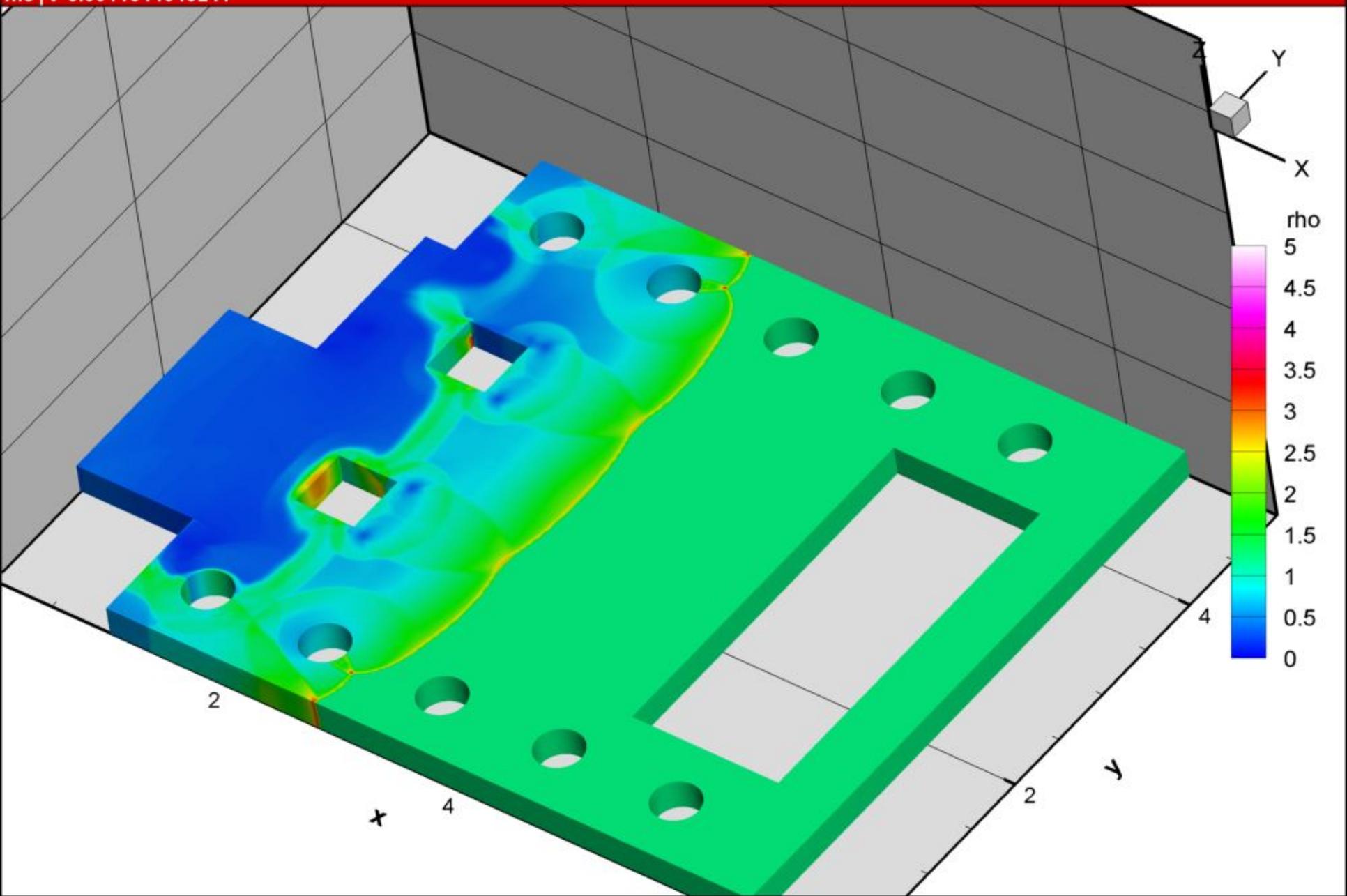
T, K | t=0.0011644043241



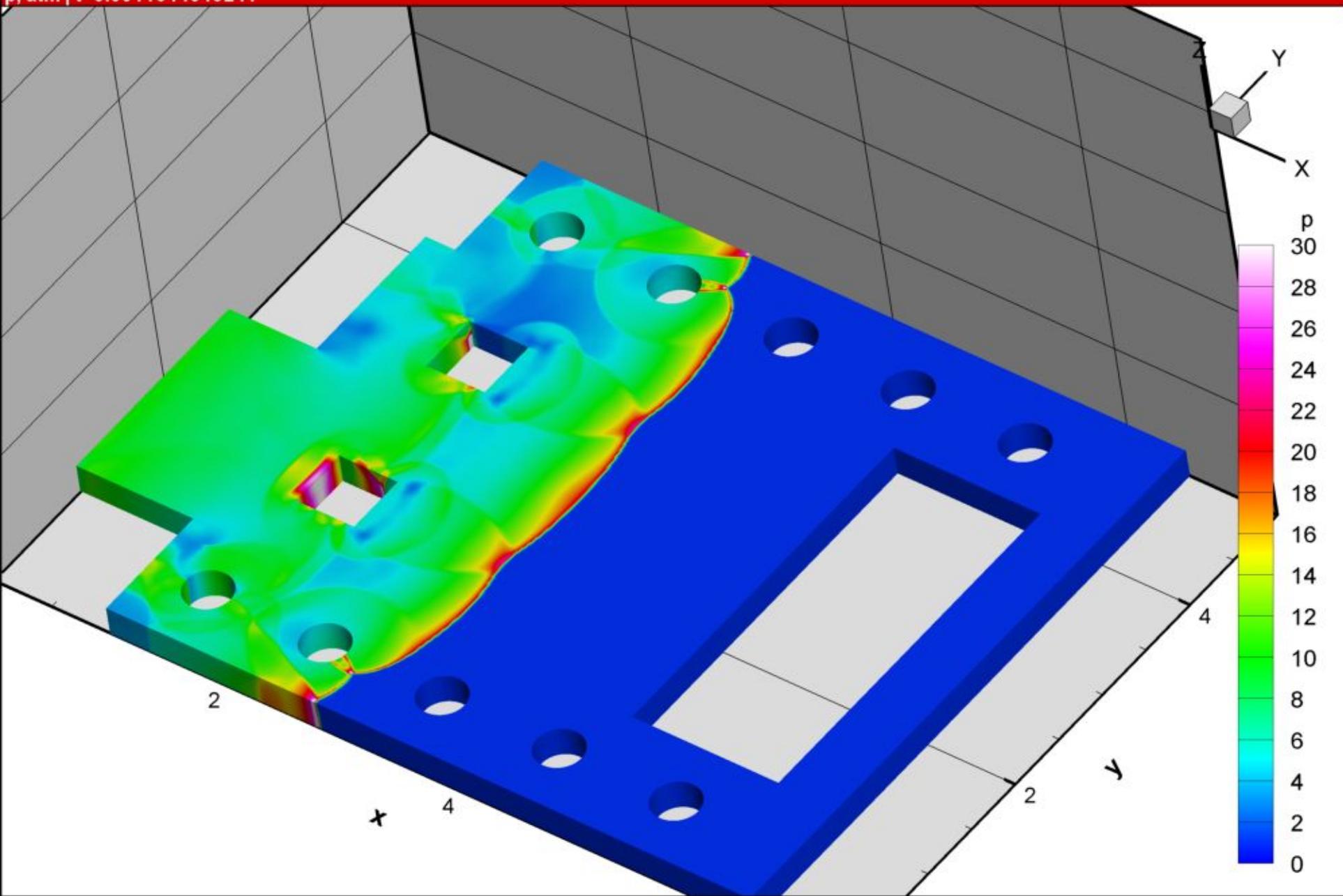
T, K | t=0.0011644043241



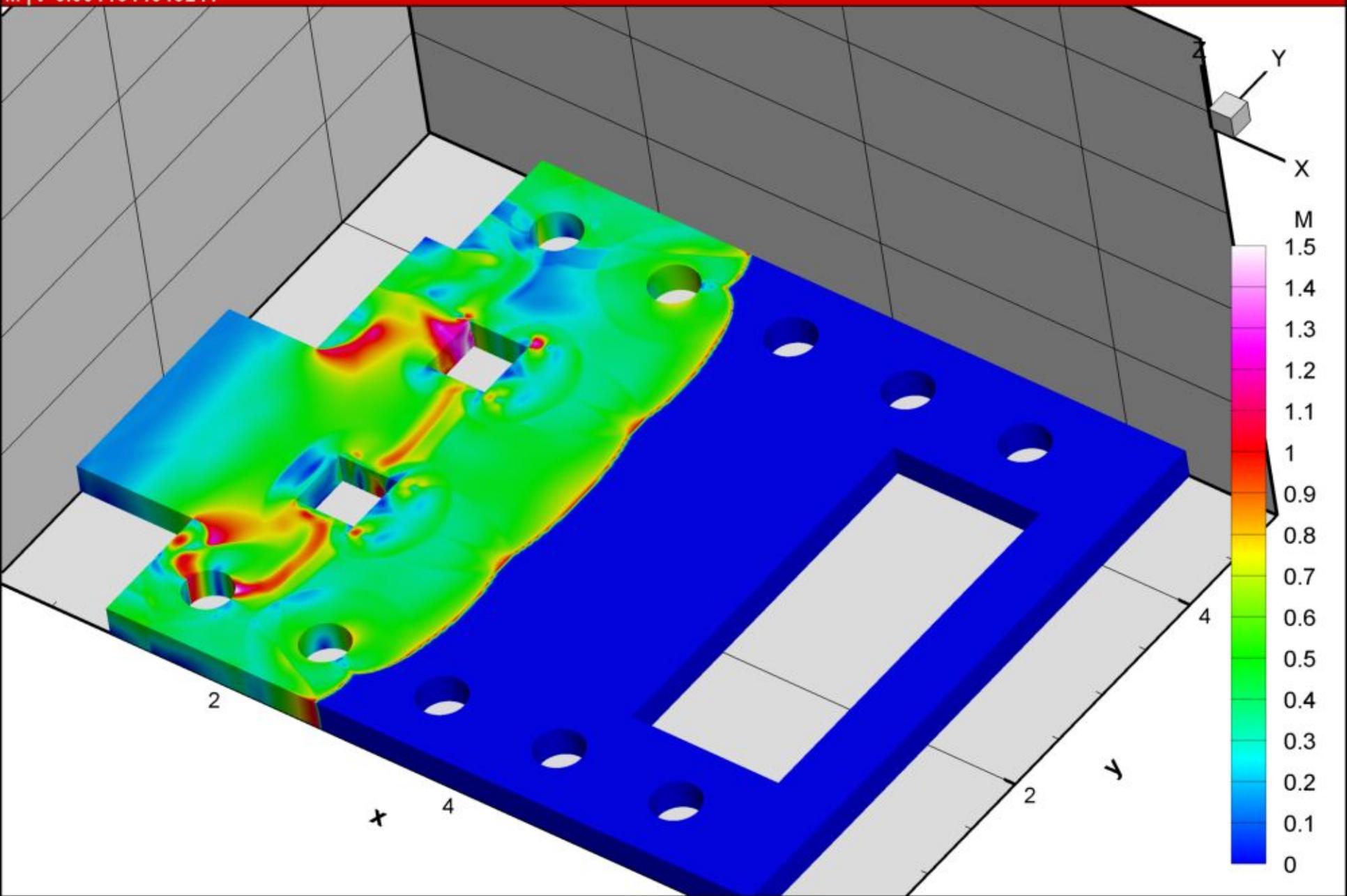
$\rho$  |  $t=0.0011644043241$

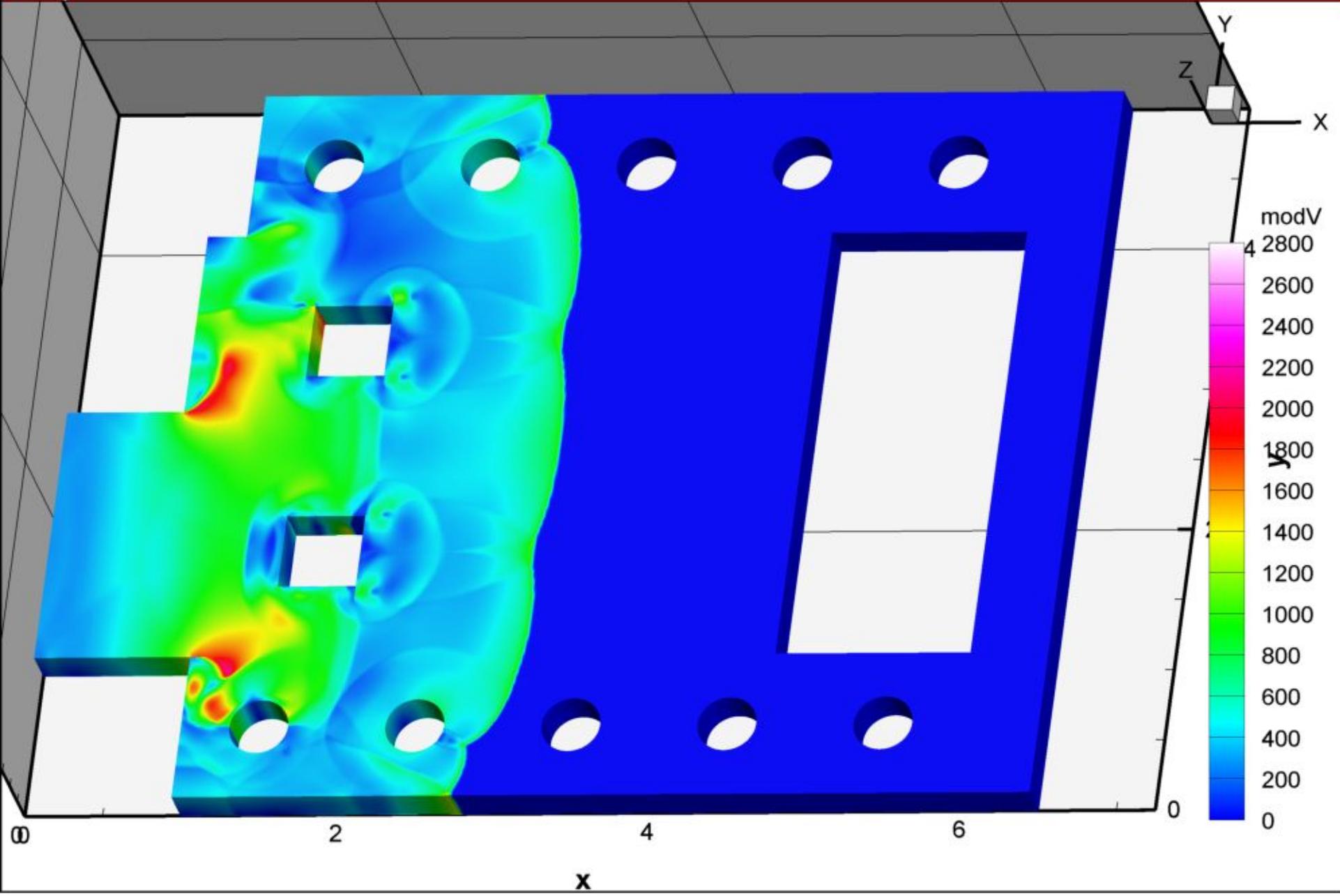


p, atm | t=0.0011644043241

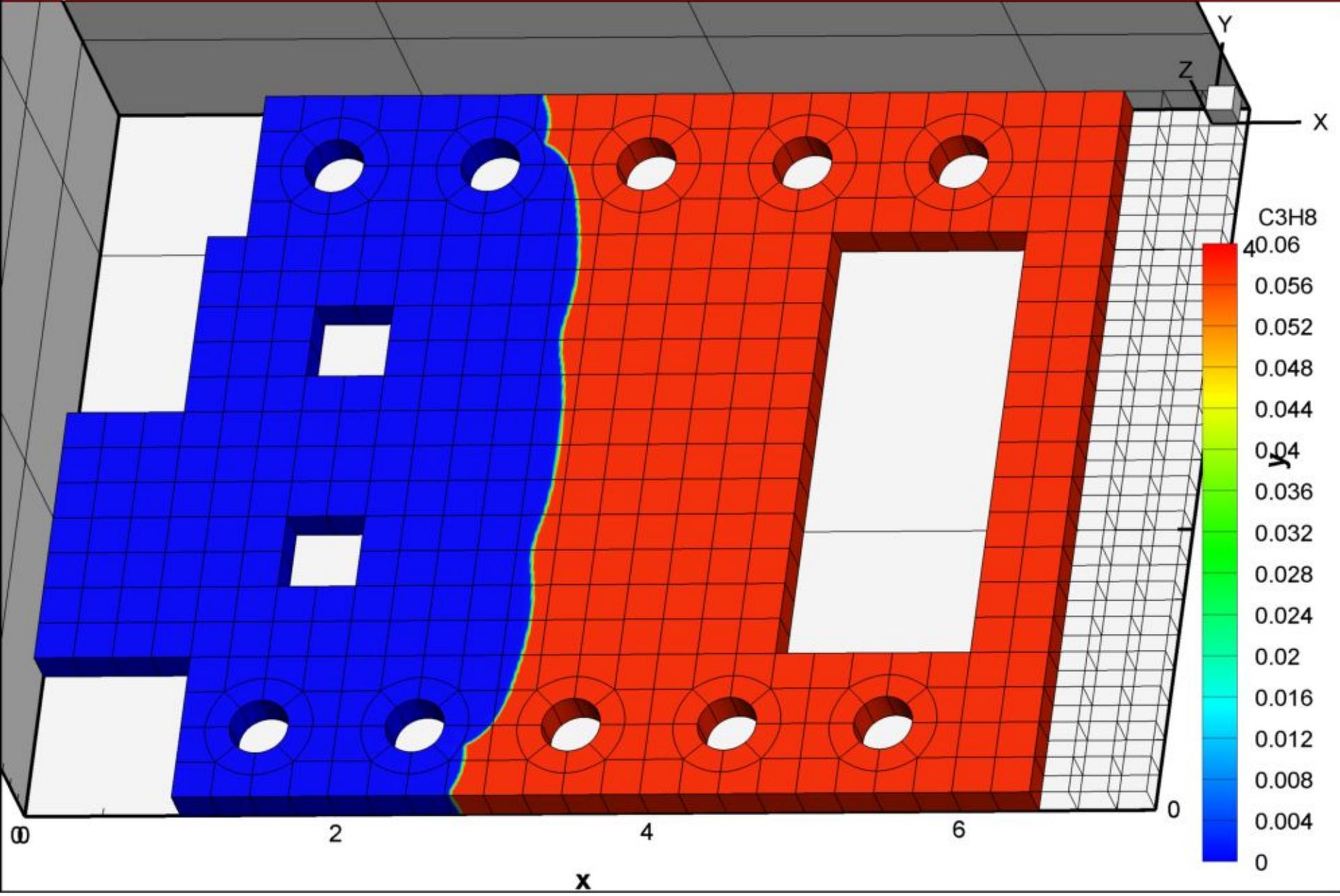


M | t=0.0011644043241



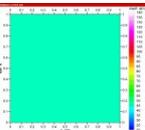
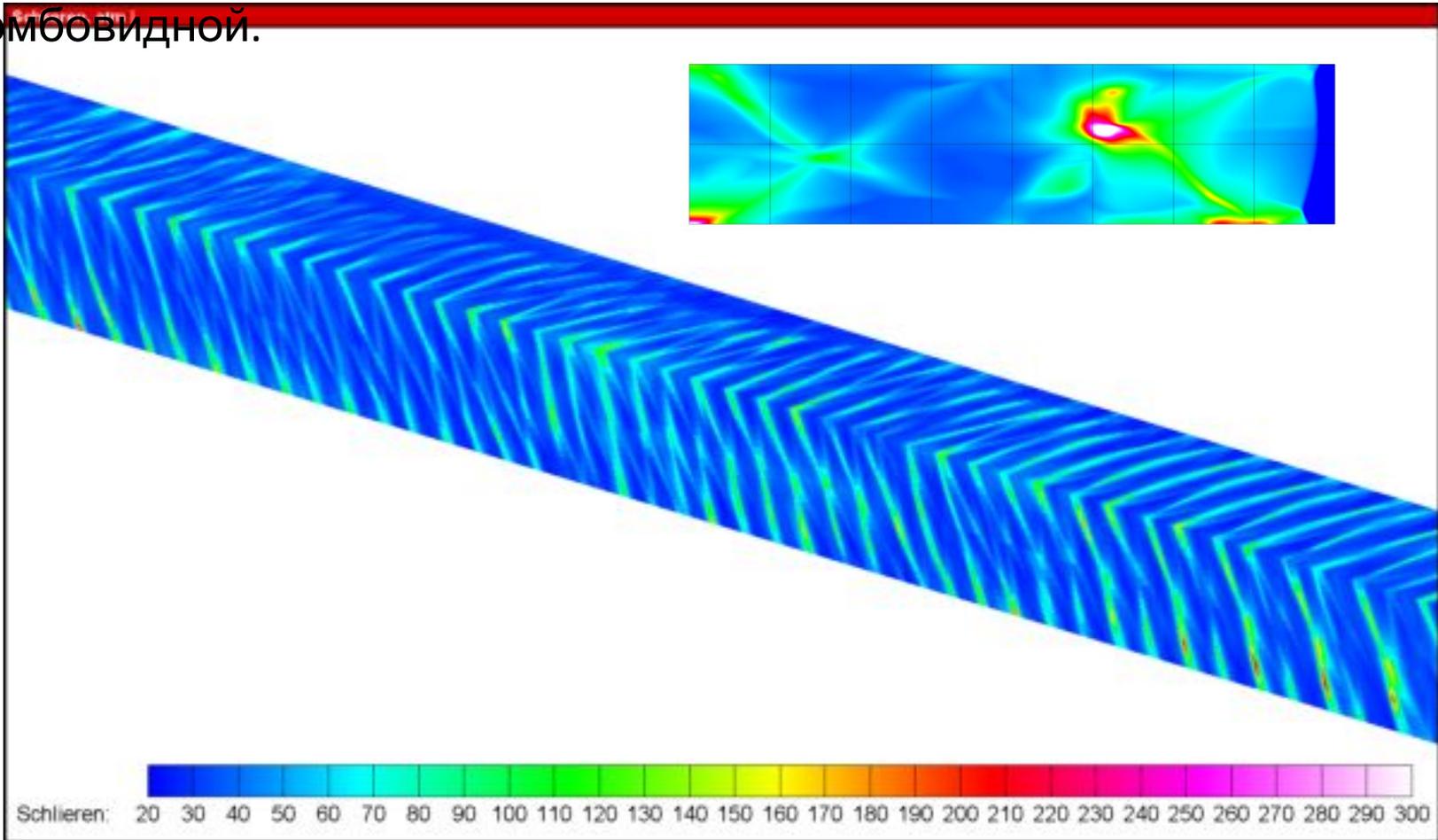


C3H8 | t=0.0011644043241



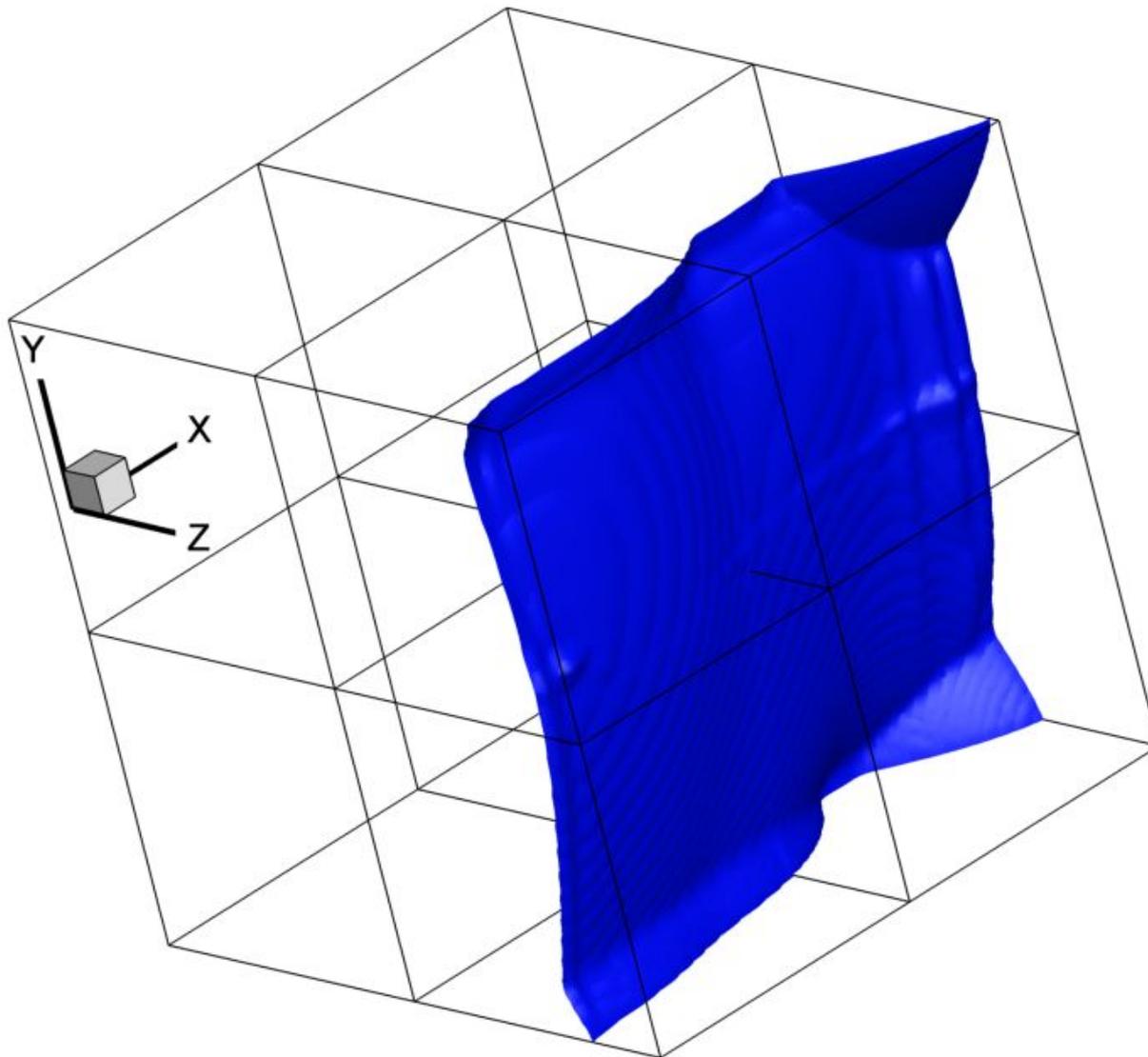
## Ячеистая детонация в трехмерных каналах

В канале длиной  $L=100$  см с квадратным сечением  $H_x=H_y=1$  см проведены расчеты детонации. Получена принципиально трехмерная ячеистая структура детонации с поперечными волнами, распространяющимися в плоскости сечения. Форма следов на поверхности канала отличается от ромбовидной.



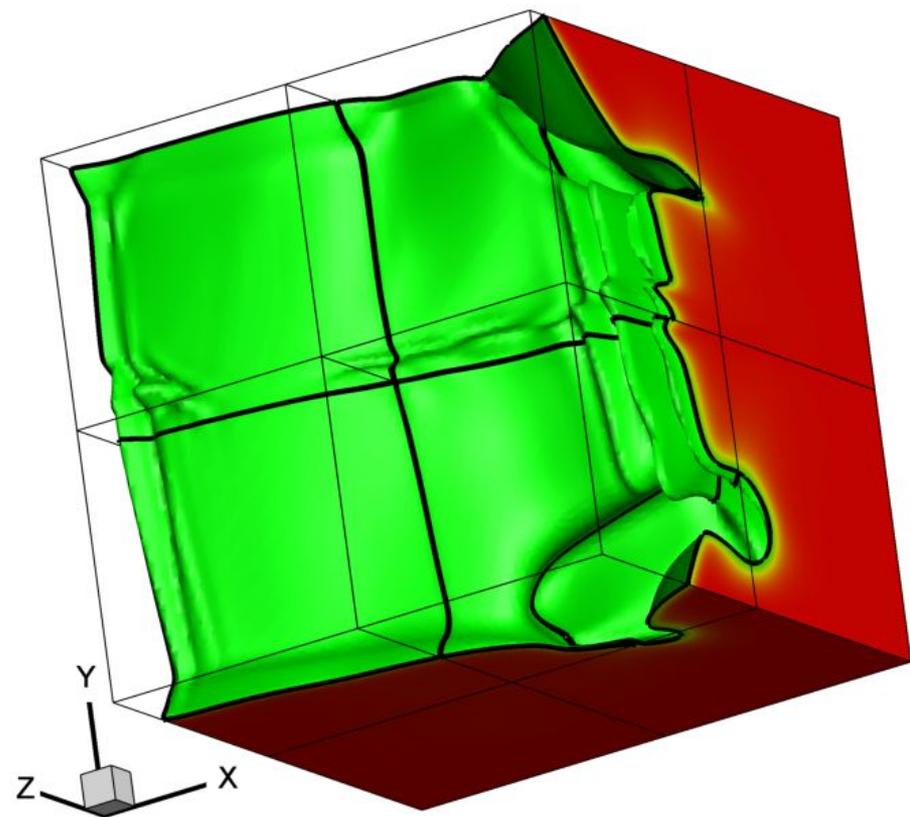
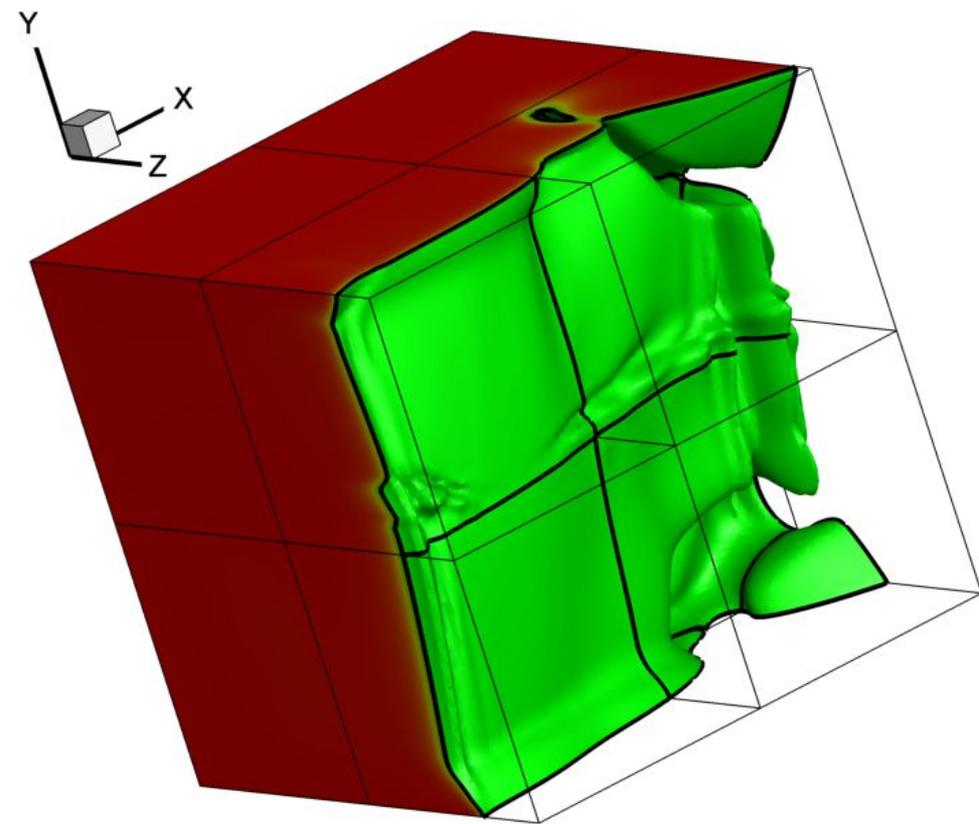
# Ячеистая детонация в трехмерном канале квадратного

Поверхность головной ударной волны при трехмерной ячеистой детонации:



# Ячеистая детонация в трехмерном канале квадратного сечения

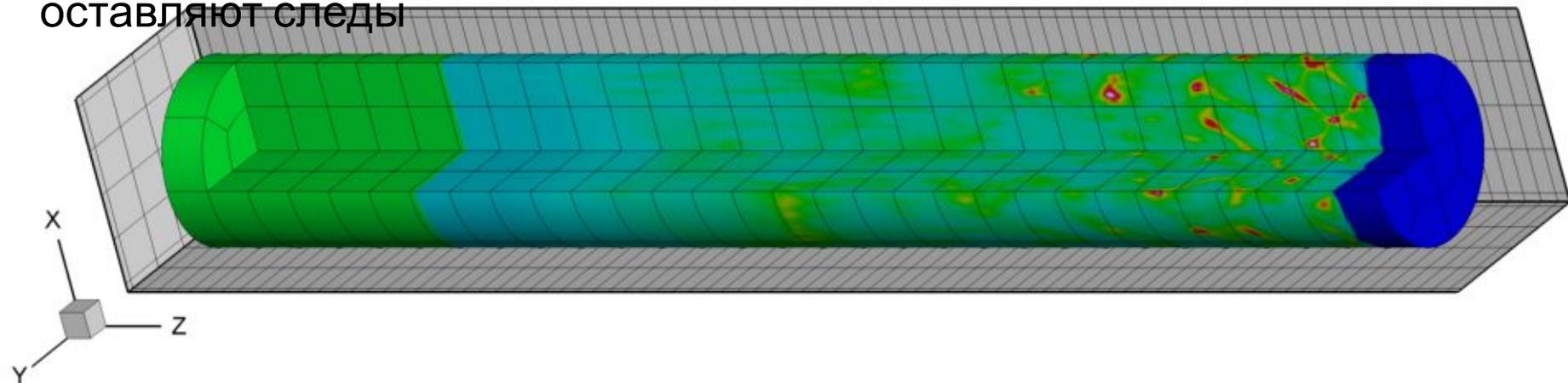
Область, где концентрация воды превышает 50% максимального значения:



При трехмерной детонации в случае ее неустойчивости по фронту распространяются поперечные волны, которые могут иметь любое направление, перпендикулярное направлению нормали к фронту. При этом структура волн и следовая картина имеют сложный вид даже для малых размеров поперечного сечения.

### Ячеистая детонация в трехмерном канале круглого сечения

В каналах круглого сечения также возникает сложная структура поперечных волн. В результате тройные точки на поверхности канала оставляют следы



Все расчеты трехмерной детонации выполнены на суперкомпьютере «Ломоносов» с числом расчетных ячеек от 100 млн. до 10 млрд. и распараллеливанием до 10000 процессорных ядер. При анализе результатов расчетов возникают определенные технические сложности, связанные с хранением данных и визуализацией картины течения.

# Выводы

**Реализован вычислительный комплекс для моделирования пространственных течений многокомпонентной инертной и реагирующей среды в открытом пространстве, в замкнутых объёмах и каналах со сложной геометрией. Возможности:**

- Расчет плоских, осесимметричных и трехмерных задач, включая задачи с переменной во времени геометрией
- Моделирование реальных физико-химических процессов
- Быстрый расчет задач и подготовка расчета
- Гибкая система подготовки, модификации и оптимизации параметров расчета (числовых данных и математических функций)
- Современный, удобный интерфейс
- Визуализация полей газодинамических параметров
- Функции экспорта результатов визуализации
- Запись в файлы полей газодинамических параметров, их зависимостей от времени в заданных точках и зависимостей от времени интегральных характеристик, таких как сила или массовый расход
- Проведение расчетов на кластерах и суперкомпьютерах с миллиардами расчетных ячеек и тысячами процессоров

**Спасибо за  
внимание!**