

Грант РФФИ № 14-11-00147 «Численное моделирование процессов взаимодействия астероидно-кометных тел с атмосферой Земли»

Руководитель: член-корреспондент РАН В.В. Шайдуров.

1. Сформированы физическая и математическая модели прохождения космического тела в атмосфере Земли. Для физической модели атмосферы взято распределение по высоте плотности, давления и температуры стандартной атмосферы. В 2014 году детально сформирована лишь двумерная модель прохождения импактного тела и ее алгоритмические и программные реализации. На этом этапе в качестве импактного тела взято исходно круглое тело, состоящее из газо-пылевой среды с однородной плотностью и существенной «вязкостью», моделирующей показатель прочности импактного газо-пылевого тела.

Для моделирования явлений, сопровождающих прохождение космического тела в атмосфере Земли, таких как абляция вещества, ионизация материала и воздуха, декомпозиция молекул, набегание спутного потока, разделение и рекомбинация ионов, динамика и влияние ударной волны, появление дипольных образований, сформирована «газодинамическая» модель взаимодействия импактных тел с атмосферой Земли. В основу математической модели, описывающей движение импактного тела в атмосфере, положены двумерные нестационарные уравнения Навье-Стокса для вязкого теплопроводного газа без упрощающих условий, которые дополнены уравнением для концентрации газо-пылевой смеси импактного тела. Они описывают законы сохранения массы, количества движения, полной энергии и концентрации газо-пылевого вещества. Замыкают систему нелинейных уравнений в частных производных алгебраическое уравнение состояния и соотношение для динамического коэффициента вязкости. В модели болид при входе в атмосферу представляет собой «газообразное» тело с плотностью и вязкостью, значительно превышающими показатели приземной атмосферы. Затем это тело трансформируется, размывается и движется в соответствии с управляющими уравнениями. Уравнение состояния газа и соотношение для динамического коэффициента вязкости согласованы с условиями плотности, концентрации газо-пылевой среды, температуры и давления, соответствующими прохождению болида через атмосферу. Закон сохранения полной энергии учитывает потери энергии на процессы ионизации материала и воздуха, декомпозицию молекул.

2. Сформированы и численно апробированы краевые условия на границе вычислительной области: на участке границы со сверхзвуковым потоком газа

применялись краевые условия выноса из вычислительной области каждой субстанции (массы газа с соответствующей газо-пылевой концентрацией, компонент скорости, внутренней энергии) вдоль траекторий, а на участке границы с дозвуковым потоком газа предложены и применены специальные краевые условия, являющиеся обобщением краевых условий с названием «do nothing», которые иногда применяются в западной научной литературе для решения уравнений Навье-Стокса в случае вязкой несжимаемой жидкости.

3. В проекте использована пошаговая по времени аппроксимация уравнений типа Навье-Стокса с помощью комбинации полу-лагранжевого метода аппроксимации совокупности производных, описывающих перенос субстанций, и конформного метода конечных элементов для остальных слагаемых. На основе комбинации этих методов разработан численный алгоритм решения сформулированной начально-краевой задачи для расширенной задачи Навье-Стокса применительно к рассматриваемой проблеме взаимодействия астероидно-кометных тел с атмосферой Земли. Для реализации такой совместной аппроксимации предложен специальный тип конечных элементов в трехмерном пространстве, содержащим время. Дискретизация по пространству остальных слагаемых задачи Навье-Стокса на каждом искомом временном слое осуществляется стандартным конформным методом конечных элементов с кусочно-билинейными базисными функциями и применением простых квадратурных формул. Для решения получающихся дискретных систем (нелинейных) алгебраических уравнений использованы простые итерационные методы с улучшенным начальным приближением внутри внешних итераций по нелинейности. Этот созданный участниками проекта алгоритм апробирован на ряде задач аэродинамики и выгодно отличается от других алгоритмов. Он обеспечивает консервативность массы, полной энергии и количества движения. Он свободен от ограничения Куранта на соотношение шагов по пространству и времени, что существенно ускоряет вычисления в подобластях гладкого поведения решения. Для работы алгоритма не требуется согласования триангуляций на соседних временных слоях, так что сгущение сетки для описания огромных градиентов в ударной волне (скачке уплотнения) не требует согласования между соседними временными слоями. Использование конформного метода конечных элементов вместо разрывного метода Галёркина существенно упрощает вопросы энергетического взаимодействия элементов движения. Специально разработанные и апробированные краевые условия на границе вычислительной области позволяют более точно воспроизводить воздействие процесса на атмосферу. Это особенно важно ввиду использования огромной вычислительной области для учёта движения спутного потока с содержанием

абляционного материала, а затем его воздействия на тормозящуюся ударную волну и возможного выброса обратного плюма. В результате проведения вычислительных экспериментов с разными данными импактных тел, их углов и скоростей входа получены разнообразные картины их взаимодействия с атмосферой.

4. Для модельной начально-краевой задачи для двумерного уравнения переноса реализованы алгоритмы полу-лагранжевой аппроксимации с целью изучения эффективности реализации этих алгоритмов на разных вычислительных архитектурах. Доказана сходимость метода с первым порядком точности без условия Куранта-Фридрихса-Леви, существенно ограничивающего шаг по времени, так что построенный метод удобен для решения задач с большими значениями скоростей.

Алгоритмы реализованы на языке Си и распараллелены для вычислительных систем как с общей памятью (технология OpenMP), так и гибридной архитектурой (технология NVIDIA CUDA). Проведены исследования и сопоставления эффективности и производительности параллельных версий. Выработаны рекомендации, определяющие выбор вычислительных и программных систем для последующей реализации алгоритмов в трехмерном случае.

5. В ходе сопоставления разных типов конечных элементов выяснилось, что эрмитовы конечные элементы обладают определенным преимуществом по сравнению с лагранжевыми элементами. Они обеспечивают такой же порядок сходимости приближенного решения, как и лагранжевы элементы той же степени. Однако размерность системы уравнений метода конечных элементов для эрмитовых элементов существенно меньше, чем для лагранжевых, особенно в трехмерном случае. Предложены два новых эрмитовых конечных элемента: биквадратный элемент на прямоугольнике и триквадратный элемент на кубе. По сравнению с лагранжевыми элементами такой же степени применение этих элементов позволяет уменьшить число неизвестных в системе уравнений в 1.5-2 раза в двумерном случае и в 2-3 раза в трехмерном. Обоснованы оценки аппроксимации, подтвержденные в двумерном случае численным экспериментом. Более того, для эллиптического уравнения второго порядка на равномерной сетке получен эффект суперсходимости в дискретной среднеквадратичной норме: вместо ожидаемого третьего порядка получен четвертый порядок точности.

Кроме того, предложено семейство новых треугольных эрмитовых элементов, предназначенных для совместного использования с прямоугольными элементами Богнера-Фокса-Шмита. Семейство включает в себя три прямоугонных элемента, которые имеют разное количество узлов на стороне, являющейся прообразом участка границы. Базисные функции всех элементов являются полиномами. Это упрощает их реализацию по

сравнению с изопараметрическими и криволинейными элементами. Результаты расчетов позволяют сделать вывод, что приближенное решение, полученное с использованием предложенных элементов в комбинации с элементами Богнера-Фокса-Шмита, имеет четвертый порядок аппроксимации в среднеквадратичной норме, обеспечивая непрерывную дифференцируемость приближенного решения вплоть до криволинейной границы.

6. Созданы физические модели порождения электрических и магнитных дипольных образований. При огромных скоростях входа космического тела в атмосферу происходит ионизация как привнесенного материала, так и воздуха. При движении иона в магнитном поле Земли на него действует сила Лоренца, причем направление действия силы Лоренца противоположно для ионов разных знаков. Поэтому при входе болида в атмосферу происходит образование, разделение и накопление ионов в спутном потоке. Таким образом, в носовой части ударной волны работает «фабрика» по производству и разделению ионов, а во всей ударной волне происходит массовая диссоциация молекул.

Время жизни ионов до их рекомбинации в спутном потоке увеличивается их изоляцией электрическими диполями. Одним из главных дипольных объектов является молекула воды, а также ее некоторые кластеры, в которые эти молекулы собираются за счет водородных связей. В результате такие кластеры и сталкивающиеся с ионом другие молекулы с дипольным моментом: воды, гидроксила (ОН), окиси углерода (СО) и других двухатомных окислов ввиду взаимодействия с его зарядом «облипают» его, изолируя от «облепленных» ионов другого знака. В последующем два таких образования с ионами разных знаков за счет кулоновской силы могут слипаться в конгломерат, оставаясь изолированными и образуя электрический диполь с еще бóльшим моментом. Проведен количественный анализ полей и величин, участвующих в процессе порождения таких электрических диполей, подтвердивший его реальность.

На сегодняшний день с большой достоверностью установлено наличие магнитных материалов в выпадающих микрочастицах импактных космических тел. Во время полета в атмосфере при абляции вещества с поверхности тела срываются перегретые частицы, содержащие железо, его соединения и окислы и являющиеся ферромагнетиками с магнитными свойствами при температуре ниже точки Кюри. Отметим явление остаточной термонамагниченности, которая образуется при остывании материала в геомагнитном поле, начиная с температуры Кюри и усиливается при дальнейшем остывании. Термонамагниченность может в десятки и сотни раз превышать намагниченность, возникающую в том же поле при комнатной температуре. Для ее разрушения требуются магнитные поля, в десятки и сотни раз превышающие создавшее ее поле. Итак, в

результате абляции и взрывов идет образование микрочастиц с содержанием железа и его окислов. В результате снижения частиц в атмосфере железо и его сплавы хоть и окисляются, но вновь порождают ферромагнитные соединения. При остывании ниже точки Кюри эти частицы приобретают магнитный момент, направленный вдоль магнитной силовой линии. Причем удельный магнитный момент может быть огромным у однодоменных частиц или вкраплений, насчитывающих несколько десятков тысяч молекул.

7. Разработаны и протестированы двумерные по пространству прототипы программных комплексов для вычислительного моделирования поведения образований из молекул и кластеров с электрическим или магнитным дипольным моментом. Моделирование процессов перестроения образований из молекул и кластеров с электрическим дипольным моментом осуществлено посредством методов молекулярной динамики с учетом электрических полей, порождаемых диполями. Каждая молекула-диполь (или кластер-диполь) моделируется материальной точкой с заданными положением, массой, скоростью и фиксированным модулем дипольного момента. Изменение направления дипольного момента происходит только путем вращательного движения молекулы. Моделирование взаимодействия таких диполей между собой и с внешним электрическим полем определяется уравнениями, описывающими напряженность полного векторного электрического поля, порожденного всеми молекулами-диполями и внешним полем. Выписана функция потенциальной энергии взаимодействия каждой молекулы-диполя с полным электрическим полем. Движение любой отдельной частицы на каждом шаге по времени представлено в виде суперпозиции поступательного и вращательного движения.

Для описания поступательного движения молекул использован второй закон Ньютона для движения центра масс молекулы. Полученная из второго закона Ньютона система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка сведена к системе ОДУ первого порядка посредством добавления в систему ОДУ неизвестных компонент скорости. Для численного решения полученной системы ОДУ реализованы три различных метода первого, второго и четвертого порядков точности из семейства явных численных методов типа Рунге-Кутты с контролем точности и устойчивости. Проведена апробация и сравнение численных методов на тестовых задачах. Наиболее точные расчеты за меньшее время вычислений получены с помощью метода Мерсона четвертого порядка точности.

Вращательное движение каждой молекулы смоделировано исходя из условия достижения минимума функции потенциальной энергии взаимодействия этой молекулы с

полным электрическим полем. Поскольку минимум энергии взаимодействия молекулы-диполя с полным полем достигается, когда вектор дипольного момента этой молекулы является сонаправленным вектору напряженности полного электрического поля в точке расположения этой молекулы, то исходя из этого условия выписаны алгебраические соотношения на вращательные компоненты дипольных моментов всех частиц. При этом учтено, что вектор дипольного момента каждой молекулы влияет на дипольные моменты всех остальных молекул. Таким образом, для математического моделирования самосогласованного электрического поля получается система нелинейных алгебраических уравнений. Для поиска численного решения применяется метод установления в задаче Коши для системы ОДУ, полученной из алгебраических уравнений. Для численного решения полученной системы ОДУ реализовано три различных метода первого, второго и четвертого порядка точности из семейства явных численных методов типа Рунге-Кутты с контролем точности и устойчивости. Проведено сравнение численных решений тестовых задач, полученных с помощью разных методов. Наиболее точные расчеты получены с помощью метода Мерсона четвертого порядка точности.

В качестве молекулы-диполя для отладки алгоритмов и программ использовались молекулы воды и ее кластеры с параметрами, соответствующими реальным физико-химическим моделям. На языке программирования C++ реализован двумерный по пространству прототип программного комплекса для вычислительного моделирования образований из диполей с самосогласованным электрическим полем. Он состоит из 30-ти пользовательских функций, которые описаны в 17-ти последовательно подключаемых модулях (библиотеках). По исполняемым операциям все модули сгруппированы в компоненты комплекса. Каждый из компонентов не зависит от остальных и выполняет законченное действие с входящими параметрами (переменными). Использован стандартный набор типов IEEE-754 для чисел с плавающей запятой, в котором максимальная точность представления вещественного числа обеспечена типом `double` и составляет 15 значащих цифр. Выбраны коэффициенты масштабирования единиц измерения физических величин. Результаты вычислений прототипа программного комплекса сохраняются в текстовых файлах с расширением «`dat`». Данные в этих файлах записываются в специальном виде для автоматической визуализации.

Для верификации программного комплекса был выбран ряд тестовых задач. Проведено сравнение полученных результатов с известными в научной литературе соответствующими теоретическими и экспериментальными результатами других авторов. Например, вычислительно подтвержден теоретический результат об ориентационном воздействии несопоставимо слабого внешнего поля на «бесконечный» плоский слой

равномерно расположенных молекул с дипольным моментом. Аналогичные расчеты проведены для случая квазиравномерного распределения молекул на плоскости.

Верификация созданного программного комплекса проведена и для образований из магнитных диполей. Проведен вычислительный эксперимент, часто наблюдаемый при взаимодействии металлической ферромагнитной пыли с полем постоянного магнита: первоначальное облако частиц, ориентированных вдоль магнитных силовых линий, затем собирается в косички. Этот же эффект получен в ходе вычислительных экспериментов: при первоначально хаотическом расположении магнитные частицы в атмосфере сначала упорядочиваются под действием магнитного поля Земли, а затем могут перестроиться в результате воздействия своего самосогласованного поля.

8. Создана программная часть базы данных на основе разработанного в ИВМ СО РАН программного комплекса SCN (Scientific Community Network), предназначенная для размещения и использования научных, учебных и методических материалов с помощью сети Интернет с разграничением прав доступа. Она решает следующие задачи.

1. Ведение библиотеки материалов в виде структурированного каталога (полнотекстовые, графические материалы и коды программ, выполненные в различных текстовых редакторах). Обеспечение классификации материалов посредством категорий, организация поиска.
2. Ведение списка часто задаваемых вопросов.
3. Информирование пользователей сайта о различных событиях (конференциях, семинарах, встречах).
4. Управление доступом пользователей: редактирование профиля, изменение пароля, назначение прав доступа.

Круг основных пользователей и наполнителей базы данных ограничен участниками Проекта и содействующими сотрудниками Института с целью контроля авторских прав на размещаемые материалы. Использование базы данных допускает три роли: пользователь, модератор и администратор. Пользователям разрешено только просматривать и скачивать книги. Модератору разрешено добавлять и удалять категории, книги и файлы. Администратору разрешены функции модератора, а также редактирование пользователей и их профилей. В программной части реализована ранее разработанная в ИВМ СО РАН ролевая модель безопасности RBAC, модифицированная с учетом специфики веб-приложений.

При создании программной части использовались технологии HTML, CSS, JavaScript, AJAX, PHP, Yii framework, СУБД MySQL. База данных имеет хранилище, работающее под управлением СУБД MySQL. Для функционирования базы данных

приобретен шестиядерный сервер в конфигурации: HP ProLiant DL160 Gen9, 1 CPU E5-2603v3 6 cores 1.6 GHz, 8 Gb RAM, 2 HDD 2 TB с расширяемым рейд-массивом. В настоящее время на сервер устанавливается операционная система Linux Ubuntu Server и выполняется необходимая настройка системы и приложений. После этого в систему начнется загрузка накопленных материалов числом около 200 файлов общим объемом 1.0 Гб.

Публикации

1. Dementyeva, E. Recovery of a boundary function by observation data in a problem for the shallow water model / E. Dementyeva, E. Karepova, V. Shaidurov // AIP Conference Proceedings. – 2014. – V. 1629. – P. 373-380. DOI: 10.1063/1.4902297.
2. Shaidurov, V. A Semi-Lagrangian Approach in the Finite Element Method for the Navier-Stokes Equations of Viscous Heat-Conducting Gas / V. Shaidurov, G. Shchepanovskaya, M. Yakubovich // AIP Conference Proceedings. – 2014. – V. 1629. – P. 19–31. DOI: 10.1063/1.4902256.
3. Andreeva, E. The semi-Lagrangian approximation in the finite element method for Navier-Stokes equations for a viscous incompressible fluid / E. Andreeva, A. Vyatkin, V. Shaidurov // AIP Conference Proceedings. – 2014. – V. 1611. – P. 3–11. DOI: 10.1063/1.4893794.
4. Шайдуров, В.В. Полу-лагранжевый метод и метод конечных элементов в моделировании сверхзвукового обтекания клиновидного профиля / В.В. Шайдуров, Г.И. Щепановская, М.В. Якубович // Материалы XVIII Международной научной конференции, посвященной 90-летию со Дня рождения генерального конструктора ракетно-космических систем академика М.Ф. Решетнева "Решетнёвские чтения". – Красноярск: СибГАУ, 2014. –Т. 2, № 18. – С. 162-163.
5. Efremov, A. A computational realization of a semi-Lagrangian method for solving the advection equation /A. Efremov, E. Karepova, V. Shaydurov, A. Vyatkin // Journal of Applied Mathematics. – 2014. – V. 2014, Art. num. 610398. – 12 p. DOI: 10.1155/2014/610398.
6. Shaidurov, V. Some properties of Hermite finite elements on rectangles / V. Shaidurov, S. Shut, L. Gileva // AIP Conference Proceedings. – 2014. – V. 1629. – P. 32-43. DOI: 10.1063/1.4902257.
7. Каропова, Е. Д. Основы многопоточного и параллельного программирования / Е. Д. Каропова. – Красноярск: Изд-во Сибирского федерального университета, 2015. (в печати).