

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
ИНСТИТУТ АВТОМАТИЗАЦИИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ РАН

*На правах рукописи*



ФОРТОВА СВЕТЛАНА ВЛАДИМИРОВНА

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ  
СРЕД С ПРИМЕНЕНИЕМ РАЗРАБОТАННОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО  
ПАКЕТА ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ HYPERBOLIC\_SOLVER

Специальность 05.13.18

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы  
программ»

Диссертация на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Москва - 2020

## Оглавление

<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	<b>5</b>
<b>ГЛАВА 1 Анализ численных методик, параллельных алгоритмов и комплексов программ для задач механики сплошных сред</b> .....	<b>18</b>
<b>ГЛАВА 2 Технология организации параллельных вычислений для численного моделирования задач, описываемых системами гиперболического типа</b> .....	<b>33</b>
2.1 Предмет исследования.....	33
2.2 Основные направления формализации подхода .....	36
<b>ГЛАВА 3 Разработка численных алгоритмов для моделирования задач, описываемых системами уравнений гиперболического типа</b> .....	<b>42</b>
3.1 Численные методики исследования.....	42
3.2 Экспериментальные исследования разностных моделей газовой динамики с ударными волнами.....	52
3.2.1 Метод Годунова с линейными распадами разрыва для одномерного случая..	54
3.2.1.1 Выбор допустимого шага по времени (условие Куранта) .....	59
3.2.2 Численный эксперимент.....	60
3.2.2.1 Анализ непрерывного решения .....	60
3.2.3 Задача с изолированной ударной волной .....	62
3.2.3.1 Формирование стационарной структуры ударной волны. Влияние числа Куранта на структуру .....	62
3.2.3.2 Характер сходимости сеточных функций.....	64
3.2.4 Задача о распаде произвольного разрыва .....	68
3.2.4.1 Конфигурация с волной разрежения и ударной волной .....	68
3.2.4.2 Конфигурация с двумя волнами разрежения.....	69
3.2.4.3 Конфигурация с двумя ударными волнами .....	71
3.2.5 Обобщение метода Годунова с линейными распадами разрывов на двумерный случай.....	73
3.2.5.1 Численный эксперимент. Задача о взрыве.....	74

<b>ГЛАВА 4</b> Пакет прикладных программ <b>HYPERBOLIC_SOLVER</b> для численного моделирования задач, описываемых системами гиперболического типа.....	<b>80</b>
4.1 Описание программного пакета <b>HYPERBOLIC_SOLVER</b> .....	<b>81</b>
4.2 Объектно-ориентированный подход к реализации пакета программ <b>HYPERBOLIC_SOLVER</b> .....	<b>85</b>
4.3 Декомпозиция вычислительной области .....	<b>93</b>
4.4 Эффективность расчетов .....	<b>97</b>
4.5 Тестовые расчеты.....	<b>98</b>
<b>ГЛАВА 5</b> Широкодиапазонные уравнения состояния для математического моделирования .....	<b>102</b>
5.1 Введение.....	<b>102</b>
5.2 Общий анализ фазовой диаграммы.....	<b>105</b>
5.3 Модели широкодиапазонных УРС.....	<b>108</b>
5.3.1 Квазигармоническая модель.....	<b>109</b>
5.3.2 Температурные возбуждения .....	<b>112</b>
5.3.3 Табличные и аппроксимационные УРС.....	<b>116</b>
<b>ГЛАВА 6</b> Численное моделирование пространственных течений в сдвиговых слоях .....	<b>120</b>
6.1 Введение.....	<b>120</b>
6.2 Математическая модель .....	<b>123</b>
6.3 Численное моделирование вихревого каскада .....	<b>124</b>
6.3.1 Условия возникновения вихревого каскада.....	<b>128</b>
6.3.2 Энергетические характеристики вихревого течения.....	<b>135</b>
6.3.3 Влияние параметров течения на структуру вихревого каскада.....	<b>140</b>
6.3.4 Влияние постоянно действующей силы на структуру вихревого каскада (задача Колмогорова) .....	<b>143</b>
6.4 Выводы.....	<b>150</b>
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ</b> Численное моделирование двумерного течения невязкой сжимаемой жидкости под действием периодического поля внешней силы - паркет Колмогорова .....	<b>151</b>
6П.1 Введение.....	<b>151</b>

6П.2	Описание эксперимента .....	153
6П.3	Постановка задачи. Численная методика .....	155
6П.4	Результаты расчетов .....	157
6П.4.1	Невозмущенная среда .....	157
6П.4.2	Возмущение продольной компоненты скорости .....	157
6П.4.3	Приближения .....	159
6П.4.3.1	Учёт источника .....	160
6П.4.3.2	Учёт искусственной вязкости.....	160
6П.4.4	Исследование влияния величины плотности.....	162
6П.4.5	Сравнение с расчетом по системе уравнений Навье-Стокса .....	163
6П.5	Выводы.....	164
<b>ГЛАВА 7 Численное моделирование высокоскоростного соударения</b>		
<b>металлических пластин. Неустойчивость контактной границы .....</b>		
7.1	Введение.....	166
7.2	Оценка газодинамических условий соударения.....	168
7.3	3D-моделирование высокоскоростного соударения двух металлических пластин .....	176
7.3.1	Постановка задачи .....	177
7.3.2	Математическая модель .....	179
7.3.3	Вычислительный алгоритм.....	179
7.3.4	Калибровка параметров УРС и граничных условий .....	181
7.3.5	Результаты вычислительных экспериментов .....	184
7.4	Выводы.....	187
<b>ГЛАВА 8 Численное моделирование взаимодействия фемтосекундного</b>		
<b>лазерного излучения с металлами .....</b>		
8.1	Введение.....	189
8.2	Результаты натурального эксперимента .....	195
8.3	Результаты численного эксперимента .....	199
8.4	Выводы .....	204
<b>ЛИТЕРАТУРА .....</b>		<b>205</b>

## ВВЕДЕНИЕ

Механика сплошных сред является обширной и очень разветвлённой наукой, включающей теорию упругости, вязкой упругости, пластичности и ползучести, гидродинамику, аэродинамику, динамику жидкости, газа и плазмы, радиационную плазмодинамику, динамику сред с неравновесными процессами диссоциации, ионизации и излучения [1,2]. В последнее время к этому списку добавилась механика релятивистских столкновений тяжелых ядер с образованием кварк-глюонной плазмы, а также обширный раздел механики космических явлений, происходящих в природе под действием гравитации и термоядерного энерговыделения [3].

Большинство задач данной области содержательно и эффективно может быть исследовано лишь с помощью современных вычислительных методов.

Настоящая работа посвящена разработке вычислительных методик и созданию пакета прикладных программ для численного решения задач механики сплошных сред, описываемых системой дифференциальных уравнений гиперболического типа. Созданный пакет использован для математического моделирования ряда задач нестационарной механики сплошной среды – трехмерного моделирования вихревых каскадов, задачи Колмогорова, гиперзвукового столкновения металлических пластин, действия фемтосекундного лазерного излучения на конденсированные мишени.

Возникшая для решения острых и ответственных задач атомной, авиационно-космической и оборонной техники, наука о численном моделировании превратилась сегодня в эффективный, совершенный и обширный раздел научного знания, без которой невозможен прогресс практически всех современных направлений человеческой деятельности.

Особого развития методы математического моделирования получили применительно к современным задачам нестационарной и многомерной механики сплошных сред [1,2], характеризующихся тем, что описывающие их соотношения представляют собой сложную нелинейную систему дифференциальных уравнений в частных производных, для которых пока что не получены точные аналитические решения. Газодинамические процессы играют важную роль в природных явлениях и жизни человека. Работа турбин, двигателей внутреннего сгорания, дыхание человека и животных, распространение загрязнений в атмосфере и океанах, полеты летательных аппаратов, атмосферные явления, функционирование систем вооружений, экстремальные процессы при релятивистском столкновении ядер, процессы деления и синтеза в горячей плазме и многие другие физические процессы

являются предметом изучения газовой динамики. С развитием компьютерной техники, магистральным, а часто и практически единственным прагматическим направлением изучения нелинейных нестационарных задач газовой динамики стало применение численных методов.

Актуальность развития методов решения, алгоритмов и разработка программных продуктов для решения задач нелинейной газовой динамики очевидна, т.к. этот компьютерный подход наиболее информативен, доступен для использования большими коллективами и отдельными инженерами и учеными. В настоящее время благодаря развитию теории разностных схем, методов решения задач механики сплошной среды и интенсивному увеличению производительности компьютерной техники, возникла возможность создания многоцелевых высокоэффективных программных пакетов для решения широкого круга задач газовой динамики. Создание подобного программного обеспечения позволяет поднять на новый уровень процесс проведения научных исследований и приводит к значительному ускорению научно-технического прогресса.

Большой вклад в развитие современных методов вычислительной гидродинамики внесли выдающиеся отечественные учёные – академики О.М. Белоцерковский, С.К. Годунов, А.А. Самарский, Б.Н. Четверушкин, А.С. Холодов, В.А. Левин; их всемирно известные научные школы и ученики в первом, втором и третьем поколениях [1-11]. Развитые к настоящему времени численные методы высокой эффективности позволяют получать физически содержательные результаты для многих ответственных нестационарных пространственных задач механики сплошных сред. При этом численные методы именно в газодинамике превратились в необходимый и широко используемый в современной инженерной практике инструмент создания конкретных технических изделий.

При решении современных задач механики сплошных сред возникает особая проблема перехода к предельно высоким (экстремальным) состояниям, занимающим новые слабо изученные участки фазовых диаграмм материалов. Необходимость численного моделирования новых задач механики экстремальных состояний особенно актуальна сегодня, когда бурный прогресс в численных методах на базе современных ЭВМ пета- и экса-флопной производительности привел к разработке эффективных разностных схем расчета нестационарных газодинамических явлений [12,13]. Данный прогресс резко повысил требования к адекватному и детальному описанию термодинамических свойств вещества, так как точность газодинамических

расчетов определяется теперь не только погрешностями в решении газодинамических дифференциальных уравнений, но и погрешностями в уравнениях состояния рассматриваемой среды.

При этом, одной из важных практических задач является создание высокоэффективных пакетов прикладных программ, позволяющих широкому кругу пользователей формулировать и решать научные и инженерные задачи при разнообразных начальных и граничных условиях. Как правило, создание таких многофункциональных кодов является сложным и затратным процессом, требующим трудозатрат в сотни человеко-лет [1]. Необходимы годы слаженной работы большого коллектива для написания, тщательного тестирования кодов и сравнения полученных результатов с натурными экспериментами. В 1999 году в ИАП РАН академиком О.М. Белоцерковским была поставлена задача создания такого компьютерного пакета, который содержал бы в себе набор надежных математических моделей и численных алгоритмов для задач, описываемых системой уравнений гиперболического типа. Предпосылками к созданию такой технологии являлся тот факт, что среди множества задач гидродинамики, можно выделить круг проблем, схожих между собой, и которые могут быть объединены в рамках сходных подходов к их решению [6,12].

Несмотря на существование разнообразных программных пакетов и библиотек, многие исследователи пишут свои собственные программы - в основном, потому что большинство этих пакетов не настолько гибки, как это необходимо исследователям. Пакеты часто не являются переносимыми, они поддерживают ограниченное количество методов, их очень тяжело интегрировать с другими программами. Часто многие из них не имеют параллельных версий.

**Целью** данной работы является создание универсального многоцелевого исследовательского пакета прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**, способного моделировать на основе системы уравнений Эйлера нестационарные газодинамические явления при широком наборе физико-математических моделей, начальных, граничных условий, уравнений состояния вещества и т.п.

Для облегчения разработки программ численного моделирования задач механики сплошной среды, с использованием набора численных методик и современного программного обеспечения в диссертации предлагается использовать унифицированный каркас приложений, который представим в виде общего ядра, встречающегося во всех программах для численного

моделирования, лежащих в описанном пространстве моделей. Разработанный программный продукт представляет собой универсальный, гибкий, расширяемый, открытый, ориентированный на стандарты каркас для построения солверов для параллельных компьютеров. Каждый альтернативный алгоритм (описывающий метод, модель и т.п.) представлен определенным «строительным» блоком, встраиваемым в каркас. Наиболее полезные и часто используемые блоки предоставлены наряду с каркасом в том же программном продукте. Каркас имеет открытый интерфейс для пользователей, которые могут подключать через данный интерфейс иные физические модели, методы, солверы, визуализаторы и другие компоненты. Для построения данного каркаса необходимо базироваться на универсальной гибкой и расширяемой методике. В диссертации описывается такая методика, представляется ее реализация в программном пакете и рассматриваются результаты применения данного пакета к численному моделированию ряда задач механики сплошных сред.

Отметим, что особым фактором при эффективном применении пакета программ для решения конкретной задачи является возможность его массового применения на персональных компьютерах с последующим переносом кода на супер ЭВМ. Разработка подобного пакета позволяет значительно сократить время решения задачи на этапе тестирования математической модели и подбора эффективного численного алгоритма, а также является инструментом для проведения экспертных расчетов качественного характера.

Необходимость решения такой задачи подтверждается мнением академика А.А. Самарского [1]: «Программный продукт должен учитывать важнейшую специфику математического моделирования, связанную с использованием ряда математических моделей и многовариантностью расчетов. Это подразумевает широкое использование комплексов и пакетов прикладных программ, разрабатываемых, в частности, на основе объектно-ориентированного программирования. Мощные компьютеры, высокоэффективные вычислительные алгоритмы, современное программное обеспечение позволяют организовать научные исследования в рамках единой технологии вычислительного эксперимента, который включает в себя теоретические и экспериментальные исследования. Многоцелевая направленность и методологическая универсальность вычислительного эксперимента позволяет на основе накопленного опыта математического моделирования, банка вычислительных алгоритмов и программного обеспечения быстро и эффективно решать новые задачи».



При создании предлагаемого в диссертации программного продукта, были реализованы его следующие **свойства**:

1. Продукт представляет собой универсальный, гибкий, расширяемый, открытый, ориентированный на принятые стандарты комплекс программ для построения солверов для параллельных компьютеров;
2. Каждый альтернативный алгоритм (описывающий метод, модель и т.п.) представляет собой отдельный блок, легко встраиваемый в комплекс программ. При этом наиболее полезные и часто используемые блоки предоставляются в том же программном продукте;
3. Комплекс программ имеет открытый интерфейс для пользователей, которые могут подключать через него разные физические модели, методы, солверы, уравнения состояния вещества, визуализаторы и иные компоненты. Построение данного комплекса базируется на универсальной гибкой и расширяемой методике;
4. Пакет программ совместим с наиболее распространенными операционными системами и может быть включен в качестве составляющего в другие более мощные современные пакеты программ.

Для достижения поставленной цели были решены следующие **задачи**:

1. Создан комплекс программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** для численного исследования широкого спектра задач механики сплошных сред на параллельных ЭВМ. Возможности пакета продемонстрированы на примерах решения нескольких различных задач механики сплошных сред.
2. Разработан линеаризованный вариант классической схемы Годунова с нелинейными распадами разрывов.
3. Проведено численное исследование плоских и пространственных нестационарных течений в сдвиговых слоях сжимаемой невязкой среды.
4. Проведено численное моделирование двумерного течения Колмогорова при наличии периодической внешней силы. Получено течение «паркет» Колмогорова и обратный вихревой каскад.
5. Рассмотрены современные требования и особенности полуэмпирических уравнений состояния вещества, являющихся необходимым элементом для моделирования газодинамических явлений при экстремально высоких давлениях и температурах.
6. Численно исследована газодинамика нестационарных ударно-волновых явлений в задаче о высокоскоростном соударении разогнанных взрывом

металлических пластин с использованием полуэмпирических уравнений состояния вещества и их упрощенных вариантов.

7. Воспроизведено наблюдаемое во взрывном эксперименте образование кольцевых волновых структур из-за развития неустойчивости Рэля-Тейлора. Результаты расчетов находятся в соответствии с экспериментом.
8. Проведено двумерное численное моделирование задачи о формировании отверстий при фемтосекундной лазерной абляции.
9. Воспроизведено наблюдаемое в лазерных опытах десятикратное превышение образовавшегося лазерного отверстия от размера фокального лазерного пятна. Предложен механизм такого превышения, основанный на боковом отрыве металла при ударном расширении ударно-сжатой диэлектрической подложки.

В рамках одного математического формализма в созданном исследовательском пакете прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** имеется возможность применять различные численные методики; устанавливать широкий спектр граничных, начальных условий и внешних сил; использовать различные уравнения состояния; применять различные средства отображения и обработки данных. В том числе, реализована возможность подключать к существующему интерфейсу новые программные «солверы» и отдельные блоки. Подчеркнем, что при включении новых моделей и алгоритмов блок распараллеливания остается неизменным. Для включения в код новых элементов пользователю достаточно внести изменения только в те части пакета, которые отвечают за физическую постановку задачи, за выбор численной методики, граничных, начальных условий, внешних сил и уравнений состояния вещества и иных новых блоков. Для облегчения разработки программ численного моделирования задач, описываемых гиперболической системой уравнений, в данной работе предлагается использовать унифицированный каркас приложений в виде общего вычислительного ядра, характерного для всех программ численного моделирования, лежащих в выбранном наборе моделей.

**Теоретическую и практическую значимость** представляют созданный исследовательский пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**, разработанная новая численная методика, внедренные в пакет программ широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества, а также результаты решения практических задач, полученные с помощью этого пакета. Разработанный пакет позволяет существенно упростить и ускорить проведение научных и инженерных исследований. Это достигается благодаря быстрому внедрению и

значительному сокращению затрат на проведение экспериментов. Полученные результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными, что позволяет в конечном итоге заменить многие натурные исследования численными. Пакет может быть применен в различных отраслях науки, техники и производства (авиакосмическая техника, системы вооружений, экология, анализ чрезвычайных ситуаций, оборонное и гражданское применение взрывов, реактивные двигатели, медицина и т.д.).

Представленная методика имеет государственную регистрацию программ для ЭВМ № 2013618035.

Партнерами автора диссертации по научной деятельности являются: Институт Теоретической физики им. Ландау РАН, Институт Физики твердого тела РАН, Объединенный Институт Высоких Температур РАН, Физический Институт РАН, Институт Проблем Химической Физики РАН, Институт математики СО РАН.

При помощи исследовательского пакета прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** исследованы следующие задачи механики сплошной среды:

- вихревые газодинамические явления, происходящие в сдвиговых слоях;
- обратный и прямой каскады неустойчивостей в течении Колмогорова;
- процессы, возникающие на поверхности металлов при высокоскоростном соударении металлических пластин;
- задачи воздействия мощного фемтосекундного лазерного излучения на металлические пленки.

Основным методом исследования в настоящей работе является вычислительный эксперимент. В диссертации исследуются вопросы, связанные с численным решением задач, описываемых системами уравнений гиперболического типа. Рассмотрены особенности программных реализаций алгоритмов и отображений этих алгоритмов на архитектуру многопроцессорных ЭВМ.

Используемые в работе параллельные алгоритмы и программные комплексы построены на основе объектно-ориентированного подхода. Эта методика программирования основана на представлении программы в виде совокупности объектов, каждый из которых является элементом определённого класса. В исследовательском пакете **HYPERBOLIC\_SOLVER** применяется стандартный интерфейс обмена

сообщениями MPI, что позволяет использовать его на разных платформах, под управлением различных операционных систем, не модифицируя при этом программный код, написанный на языке C++. В пакете **HYPERBOLIC\_SOLVER** используется модель программирования SPMD (Single Program, Multiple Data), в которой одновременно исполняются несколько копий одной программы параллельно на разных процессорах. Каждый процесс программы выполняет одну и ту же программу, но в зависимости от своего номера выполняет свою порцию вычислений. Существует один мастер-процесс, который кроме выполнения общей для всех процессов вычислительной части также управляет другими процессами и осуществляет ввод/вывод данных задачи. Достоинством этой модели является то, что нужно поддерживать только одну версию программного кода, который к тому же не зависит от количества процессоров, при этом количество процессоров задается в качестве параметра. Исследовательский пакет **HYPERBOLIC\_SOLVER** предоставляет пользователю возможность запуска результирующей программы, как состоящей только из одного процесса, так и на кластере машин с различными операционными системами при использовании соответствующих реализаций MPI. Пакет **HYPERBOLIC\_SOLVER** тестировался на платформах: Intel, Param, MBC-1000, с операционными системами: Windows, Solaris, Linux, использовались реализации MPI: WMPI и MPICH.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Технология компьютерных вычислений для численного моделирования задач, описываемых системами уравнений гиперболического типа.
2. Программный продукт **HYPERBOLIC\_SOLVER** для численного моделирования широкого спектра задач нестационарной механики сплошных сред. Возможности пакета продемонстрированы на серии различных задач, описываемых системой уравнений гиперболического типа.
3. Линеаризованная версия классической схемы Годунова с нелинейными распадами, в которой распады разрывов заменены их упрощенными вариантами. Численно исследованы задачи о распадах сильных разрывов. Установлены зависимости ширины фронта ударных волн и времени их образования от выбора числа Куранта и шага расчетной сетки.
4. Численное моделирование развития вихревого каскада в сдвиговом слое невязкой среды при переходе от двумерного к трехмерному течению. Показано влияние начальных, граничных условий, ширины сдвигового слоя и величины сдвиговых скоростей на возникновение вихревого каскада;

с точностью 20 процентов подтвержден «закон  $-5/3$  Колмогорова» на инерционном участке энергетического спектра.

5. Расчет двумерного течения Колмогорова при наличии периодического поля внешней силы. Проведено моделирование процесса формирования режима течения типа «паркет» в слое сжимаемой идеальной среды. В расчетах получены прямой и обратный каскады и крупномасштабные когерентные структуры. Показана роль начальных условий на формирование вихревого «паркета».
6. Численное моделирование процессов, происходящих при высокоскоростном столкновении разогнанных взрывом химических ВВ металлических пластин с использованием различных уравнений состояния вещества. Результаты численных экспериментов показывают наличие трехмерной неустойчивости Рэля-Тейлора на контактной границе раздела металлов, приводящие к образованию кольцевидных кратеров. Проведено сравнение результатов численных экспериментов с данными натуральных технологических экспериментов.
7. Численное моделирование механизма формирования технологических отверстий при фемтосекундной лазерной абляции золотой пленки, напыленной на толстую стеклянную подложку. На основе ударно-волнового механизма дан теоретический и численный анализ механизма отрыва пленки. В расчетах воспроизведено наблюдаемое в технологических лазерных экспериментах вызванное боковым разлетом значительное (до 10-ти раз) превышение наблюдаемых размеров отверстий над размерами фокального лазерного пятна.

Достоверность результатов подтверждена многочисленным и всесторонним тестированием кода, специальными исследованиями устойчивости и сходимости решений на различных сетках, сравнением результатов расчетов с данными теории, автомодельными решениями классических задач, а также непосредственным сравнением с экспериментальными данными. Исследовательский пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** тестировался на одномерных задачах: задаче о распаде разрыва, на тестах Лакса и Сода, Торо. Многомерное тестирование проводилось на задаче о двойном маховском отражении, которая моделировалась с помощью разных числовых схем и алгоритмов. Также проведено сравнение различных разностных схем, используемых в разработанном пакете программ на различных сеточных шаблонах.

На основе численного моделирования воспроизведены эффекты, зафиксированные в натуральных экспериментах:

- ✓ переход к развитому вихревому течению в сдвиговых слоях через прямой вихревой каскад неустойчивостей;
- ✓ двумерные когерентные структуры типа «паркета» Колмогорова, обратный вихревой каскад;
- ✓ кольцевидные структуры на поверхности металлических пластин при высокоскоростном ударе;
- ✓ отрыв тонкой металлической пленки с поверхности толстой диэлектрической подложки при лазерной абляции.

Результаты работы докладывались на всесоюзных, российских и международных конференциях, семинарах и симпозиумах:

- Turbulent Mixing and Beyond International Conference and Advanced School, 2010, 2012, 2014, 2016 Trieste, Italy;
- Russian-Japanese Workshop on Computer Sciences, November 2010, Moscow, Russia;
- 12th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing, July 2010, Moscow, Russia;
- International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, 2011-2019, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia;
- Russian-Indian Workshop on Computational Physics and Mathematics, September 2011, Moscow, Russia;
- Международная конференция «Турбулентность и волновые процессы», 2013, МГУ, Москва, Россия;
- XII International Symposium on Explosive Production of New Materials: Science, Technology, Business, and Innovations (EPNM-2014), 2014, Poland;
- International Symposium on Convective Heat and Mass Transfer, 2014, Turkey;
- 57-я научная конференция МФТИ, ноябрь 2014, Московская обл., Долгопрудный, Россия;
- VIII школа-семинар «Современные проблемы нелинейной механики», апрель 2015, МАМИ, Москва, Россия;
- Конференция «Современные проблемы электрофизики и электродинамики», 2015, Санкт-Петербург, Россия;
- 11-й Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, 2015, Казань, Россия;
- XIII International Symposium on Explosive Production of New Materials:

- Science, Technology, Business, and Innovations (EPNM-2016), 2016, Coimbra, Portugal;
- XXII международная конференция «Нелинейные задачи теории гидродинамической устойчивости и турбулентность», 2016, Москва, Россия;
  - Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» с элементами школы молодых ученых, 19-25 сентября 2016, Ялта, Крым;
  - EUROMECH Colloquium Dynamics of Concentrated Vortices, May 2016 Novosibirsk, Russia;
  - 3-я международная конференция «Неизотермические явления и процессы: от теории теплового взрыва к структурной макрокинетике», ноябрь 2016, Московская обл., Черноголовка, Россия;
  - Joint Meeting of Plasma Physics Collaboration at FAIR and 8th International Workshop on Plasma Physics with Intense Laser and Heavy Ion Beams (PP@FAIR & WLIV 2016), December 2016, Moscow, Russia;
  - II Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» с элементами школы молодых ученых, 11-17 сентября 2017, Ялта, Крым;
  - 60-я научная конференция МФТИ, ноябрь 2017, Московская обл., Долгопрудный, Россия;
  - XIX International conference on the methods of aerophysical research, 13-19 August 2018, Novosibirsk, Russia;
  - XXII Всероссийская конференция «Теоретические основы и конструирования численных алгоритмов решения задач математической физики», 3-8 сентября 2018, Новороссийск, пос. Абрау-Дюрсо, Россия;
  - III Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» с элементами школы молодых ученых, 10-16 сентября 2018, Ялта, Крым;
  - Международная школа-конференция «Соболевские чтения», 10-16 декабря 2018, Новосибирск, Россия;
  - Пятый слет разработчиков Отечественных CFD-кодов, 1-2 декабря, 2018, Москва, Россия;
  - XXI Международная конференция по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019), 24-31 мая 2019, Алушта, Крым;
  - XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, 19-24 августа 2019, Уфа, Россия;

- Международный Симпозиум «Fundamentals of laser assisted micro- and nanotechnologies», 30 июня-04 июля 2019, Санкт-Петербург, Россия;
- Conference «Mathematics and its Applications», посвященная 90-летию академика С.К. Годунова, 5-9 августа 2019, Новосибирск, Россия;
- IV Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» с элементами школы молодых ученых, 15-22 сентября 2019, Ялта, Крым;
- V Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛаПлаз-2019, 12-15 февраля 2019, Москва, Россия;
- 32nd International Symposium on Shock Waves, 14 - 19 July 2019, Singapore;
- XIII Международная конференция по Прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (АММАГ'2020), 6-13 сентября 2020, Алушта, Крым;
- V Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» с элементами школы молодых ученых (ТФГ-2020), 13-20 сентября 2020, Ялта, Крым.

### **Использование результатов**

Исследовательский пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** внедрен в научных и промышленных организациях и высших учебных заведениях. Среди них:

- АО «Московский Институт теплотехники»;
- ПАО РКК «Энергия»;
- АО «НИИМЭ»;
- ЦАГИ.

Акты внедрения прилагаются к диссертации.

### **Личный вклад**

Автор является основным разработчиком пакета прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**.

При непосредственном участии автора были поставлены задачи, проведены численные эксперименты и сделан их анализ. Основные положения и результаты, выносимые на защиту, отражают личный вклад автора.

Автор является руководителем грантов и программ ряда научных фондов:



- Грант РФФИ № 17-11-01293 «Фундаментальные аспекты математического моделирования на суперкомпьютерах воздействия интенсивных потоков направленной энергии на материалы»;
- Грант РФФИ № 17-01-00812 «Разработка программного комплекса Turbulence Problem Solver для численного моделирования задач механики сплошных сред»;
- Программа фундаментальных исследований Президиума РАН I.33П. «Фундаментальные проблемы математического моделирования».

**Результаты диссертации опубликованы в 64** печатных изданиях: **40** статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ и входящих в списки WoS, Scopus и/или RSCI, а также **24** публикации в сборниках материалов конференций. По результатам диссертации оформлено **1** свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ.

**Диссертация состоит** из введения, восьми глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 227 страниц, текст содержит 92 рисунка и 8 таблиц. Список литературы содержит 275 наименований.

## ГЛАВА 1 АНАЛИЗ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДИК, ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ И КОМПЛЕКСОВ ПРОГРАММ ДЛЯ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД

Основой создания вычислительного комплекса программ является выбор одной или нескольких эффективных численных методик для интегрирования системы дифференциальных уравнений [1,2,8,9]. Отметим основные классы численных методов, которые применяются для решения нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных.

Это конечно-разностные методы [3,14]; характеристические методы [15]; сеточно-характеристические методы [16]; метод конечных элементов [17]; методы динамики вихрей [18]; метод интегральных соотношений [19]; метод частиц в ячейках [20]; метод крупных частиц [21]; метод маркеров в ячейках [22]; статистические методы типа Монте-Карло [23]; кинетически-согласованные разностные схемы [24] и ряд других методик [25].

Кратко проанализируем ряд идей, предложенных при разработках различных методов и подходов [3,16,12]. Система уравнений гиперболического типа обладает свойством конечной скорости распространения возмущения в области интегрирования и наличия характеристических линий и поверхностей, ограничивающих области влияния решений [12,4]. Кроме того, в каждой точке пространства эта система может быть расщеплена на  $N$  независимых уравнений переноса в характеристических переменных. В случае уравнений баротропного газа в работе впервые [26] рассмотрены характеристические свойства этих уравнений и введены их первые интегралы, названные впоследствии инвариантами Римана [26]. Более подробно характеристические свойства систем уравнений гиперболического типа обсуждаются в работах [27-29].

Первые численные методы для систем уравнений гиперболического типа были основаны на использовании характеристических свойств этих уравнений, как для аппроксимации самих уравнений, так и для построения разностной сетки [30], а также для доказательства сходимости численного решения к точному [31] – известное условие устойчивости Куранта-Фридрихса-Леви и число Куранта. В нелинейном случае данное условие устойчивости анализируется в работе [32]. Применение указанных методов возможно для построения достаточно гладких решений и требует явного выделения разрывов. В этом направлении перед обычными сеточными методами дает преимущество использование обратных или сеточно-характеристических методов [33,34], где аппроксимируются не исходные

уравнения, а специальные их линейные комбинации. Здесь стали учитываться условия совместности вдоль характеристических направлений с той или иной интерполяцией параметров в точках пересечения характеристик с плоскостью, на которой данные уже известны (начальной или ранее рассчитанной) [33-35]. Данные методы не являются консервативными и требуют для своего применения явного выделения разрывов.

Отметим еще одну особенность систем уравнений гиперболического типа – известная «градиентная катастрофа». Она заключается в возможности появления разрывных решений даже при гладких краевых условиях для нелинейных систем уравнений. Для линейных систем источником разрывов также могут быть разрывные функции в начальных или граничных условиях. Схемы на регулярных, а не характеристических сетках и без приведения исходных уравнений к характеристическому виду являются альтернативными методами, способными воспроизводить разрывные численные решения без явного выделения разрывов [35,36].

Отметим ряд схем со свойствами консервативности. Они основаны на аппроксимации дивергентных уравнений, записанных в интегральной форме, и обеспечивают выполнение дискретных аналогов соответствующих законов сохранения, что и позволяет численно находить разрывные решения без явного выделения разрывов. Одной из базовых конечно-разностных схем является схема Куранта-Изаксона-Риса [32], являющаяся схемой «бегущего» счета, вследствие того, что при расчете по ней вычисления бегут от одной границы к другой, что удобно для решения смешанной задачи Коши.

Класс монотонных схем (или схемы с положительной аппроксимацией) переводят монотонный профиль решения на одном временном слое в также монотонный профиль решения на следующем временном слое. Существуют различные способы монотонизации разрывных численных решений, начало которым положено введением искусственной вязкости в немонотонные схемы в работе [37]. Здесь в схеме типа «крест» впервые предложен метод использования псевдовязкости для обеспечения устойчивости решения путем сглаживания контактных разрывов. В работе [38] использована центрально-разностная схема, получившая имя Лакса-Фридрихса. Схема из работы [39] обладает тем свойством, что в ней вязкость аппроксимации не приводит к размазыванию контактного разрыва и обеспечивает второй порядок аппроксимации. [40] Более экономичная двухшаговая схема, приводящая к той же схеме Лакса-Вендрофа, на первом шаге которой используется схема Лакса-Фридрихса, а на втором – схема «чехарда», рассмотрена в [40]. В [41]

используется двухшаговый метод для квазилинейного уравнения, на разных шагах которого вычисляются разности вперед и назад - метод Мак-Кормака. [41] совпадает с методом Лакса-Вендрофа для линейных систем уравнений. Для нелинейных систем – по сравнению с методом Лакса-Вендрофа он дает лучшие результаты на движущихся разрывах [39]. Как правило, подобные схемы используют искусственную вязкость для стабилизации явного разрешения конечно-разностных аналогов исходных уравнений.

В ряду наиболее распространенных подходов необходимо отметить заслуживший мировое признание класс методов С.К. Годунова [42-46]. В работе [42] С.К. Годуновым была предложена схема расчета задач одномерной газовой динамики с разрывными решениями – ударными волнами. Схема основана на использовании решений задачи Римана о распаде разрыва и допускает наглядную физическую интерпретацию: вычисления по ней сводятся к расчету распада разрыва с последующим осреднением по каждому из сеточных интервалов. Данная схема приобрела всемирную известность как схема Годунова [42-47] и на данный момент является широко используемым стандартным инструментом численного исследования проблем механики сплошных сред. Отметим фундаментальную работу С.К. Годунова [43], где доказана теорема о несуществовании линейной монотонной схемы для уравнения переноса выше первого порядка аппроксимации. Там же предложена монотонная схема, имеющая первый порядок, на каждом шагу которой в соседних ячейках точно решается задача Римана о распаде разрыва.

Она получила признание и нашла широкое применение как в России, так и за рубежом. Многочисленные модификации схемы Годунова активно используются учеными для решения различных прикладных задач. В частности, исследования, проведенные С.К. Годуновым совместно с автором диссертации за последние годы, посвящены линеаризованному варианту данной схемы. Глава 3 настоящей диссертации посвящена построению и исследованию свойств этой схемы [47]. Особое внимание здесь уделено значению закона «неубывания энтропии».

Как известно [2,12,29], при прохождении газа через ударную волну (разрыв в решении) энтропия возрастает. Это утверждение составляет содержание теоремы Цемплена и является постулатом, входящим в определение обобщенных решений [12]. В схеме Годунова этот закон выполняется автоматически благодаря тому, что этому закону удовлетворяют входящие в конструкцию схемы решения задач Римана о распадах произвольных разрывов и тому, что энтропия возрастает при осреднении по

счетным ячейкам. Такое осреднение завершает расчет каждого шага по времени. Данное свойство схемы Годунова позволяет с помощью численных экспериментов сформулировать понятие обобщенного решения для задач газовой динамики с ударными волнами. Схема полностью консервативна, а использование механизма распада разрыва делает явную схему устойчивой при выполнении стандартных ограничений на величину шага по времени.

В последние десятилетия интенсивно развивались методы ограничения потоков (flux limited) и методы коррекции потоков (flux corrected). В первом случае используются специальные функции (limiters), не позволяющие потоку (или скорости) по определенным критериям превысить некоторые значения. Тем самым достигаются, в частности, безосцилляционные решения на ударных волнах и других разрывах. Вид этих функций существенно зависит от режимов течений и типов используемых аппроксимаций. Способ построения монотонных схем путем их модификации с помощью процедуры линейной реконструкции решения и ограничения потоков рассмотрен в работах [49-51]. Схема второго порядка по пространству MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws), предложенная в [51], основана на приближенном решении задачи Римана в лагранжевых координатах. Здесь описан оригинальный способ вычисления частных разностей для систем уравнений. Методы, реализующие данный подход к вычислению разностей, получили название методов MUSCL-типа (например, метод 4-го порядка реализован в работе [52]).

В работах [34,53] предложена векторная схема для решения векторной задачи Римана и изложен общий сеточно-характеристический подход для численного решения гиперболических систем уравнений. Подобная форма записи использована в [54-57], введено понятие функции-ограничителя и предложен ограничитель SuperBee [57]. Данный тип схем [54] можно отнести к классу линеаризованных схем Годунова, основанный на приближенном решении задачи о распаде произвольного разрыва (линеаризованной задачи Римана), и использующий при построении решений только разрывы. Этот метод точно описывает соотношения на одиночных разрывах и скорости их перемещения, однако, при этом возможно возникновение нефизических ударных волн разрежения. Данный метод был построен для уравнений газовой динамики и распространен на МГД-уравнения и уравнения мелкой воды.

Следует упомянуть и иные способы ограничения потоков в численных схемах Роу [58-59], которые используют, например, ограничитель MinMod, и использованный в [60] в схеме UNO второго порядка, а также «острый»

ограничитель, предложенный в [61] и повышающий порядок схемы до третьего.

Отметим класс методов с разностным расщеплением потоков, основанными также на приближенном решении задачи Римана [62,63]. Свое название эти методы получили, основываясь на представлении решения в виде суперпозиции движущихся в прямом и обратном направлениях дискретных волн. Они используют при построении решений задачи только волны сжатия и разрежения, вследствие чего удается заменить ударные волны римановыми волнами сжатия. Данный метод также имеет реализации для уравнений газовой динамики, МГД-уравнений, уравнений мелкой воды.

Другой тип векторного расщепления потоков ван Лира основывается на Больцмановском распределении скоростей частиц и представлении решения в виде взаимодействующих псевдочастиц [64]. Расщепление Стигера-Уорминга [65] использует тот факт, что половина частиц движется с одной характеристической скоростью, а другая половина – с другой скоростью.

Существенно повысить реальную точность численных методов и разрешения разрывов в численных решениях удастся за счет различных факторов – выбора сеточных шаблонов, базовых разностных схем (монотонных первого порядка аппроксимации и немонотонных с высоким порядком аппроксимации) и переключателей между этими схемами.

Рассмотрим несколько подходов к построению монотонных схем. Основные принципы построения монотонных схем предложены в работе [66]. Среди них выделим класс гибридных схем (схемы с переменным порядком аппроксимации – первым вблизи разрывов и более высоким в области гладкого решения), различные варианты метода коррекции потоков: подход ван Лира с использованием реконструкции решения для решения задачи Римана [64], подход Роу на основе метода расщепления потоков [58,59], подход Хартена для TVD методов с модификацией потоков [67]. В работе Белоцерковского, Гущина и Коньшина [68] была предложена гибридная монотонная разностная схема второго порядка по времени и по пространству. Эта схема имеет второй порядок точности на гладких решениях и, являясь монотонной, не использует ни искусственную вязкость, ни сглаживание, ни процедуры ограничения потока, часто использующиеся в современных схемах вычислительной динамики жидкости. Данная схема является одной из используемых в пакете прикладных программ, описанном в последующих главах.

Кратко остановимся на классе TVD-схем, развитие которых представлено в работах Хартена [59,69,70]. Основное свойство TVD-схем –

возможность уменьшать полную вариацию функций, что является более слабым требованием, чем монотонность. Метод энтропийной коррекции [69], широко применяемый во многих TVD-схемах, позволяет построить схемы более высокого порядка, которые не осциллируют на разрывах решения. Среди схем более высоких порядков стоит упомянуть схему Чакраварти-Ошера [71], схемы ENO [72], UNO [51] и многие другие, более подробно описанные в книге [12]. Достаточно общий подход к построению подобных схем с использованием анализа разностных схем в пространствах сеточных функций предложен Холодовым в [73].

Методы частиц соответствуют большому классу, содержащему значительное количество различных модификаций. Начало положил метод частиц в ячейках Харлоу [74]. Термин «метод частиц» является общим для класса вычислительных моделей, в которых дискретное описание физических явлений включает использование взаимодействующих частиц. Область решения здесь разбивается неподвижной сеткой. Сплошная среда считается дискретной – рассматривается совокупность «частиц» фиксированной массы, которые движутся сквозь сетку ячеек. Частицы служат для определения параметров самой жидкости (массы, энергии, скорости), а сетка используется для определения параметров поля (давления, температуры, плотности). Метод частиц в ячейках позволяет исследовать сложные явления в динамике многокомпонентных сред, следить за линиями раздела сред и взаимодействиями разрывов. К недостаткам методов частиц следует отнести дискретность описания среды, что может приводить к нефизичному обнулению плотности или давления в ячейках в случае расчета разреженных сред и соответствующим осцилляциям решения. Тем не менее, в середине 60 годов появились модификации методов частиц, позволившие устранить многие недостатки, присущие данному классу методов. Одним из наиболее распространенных является метод крупных частиц [21]. Он прост в концептуальном плане, легко реализуется при написании программы и так же включен в разработанный программный продукт.

Не менее оригинальные подходы использованы при построении кинетически- согласованных разностных схем в [75]. Данная модель основана на представлении одночастичной плотности распределения в виде максвелловской функции, слабо меняющейся на расстоянии длины свободного пробега.

Отдельно отметим способы построения численных методов для многомерных уравнений и систем гиперболического типа. В основном они

опираются на расщепление исходного многомерного оператора на одномерные [14,76]. Подходы к построению разностных схем на неструктурированных сетках, используемых для решения задач в сложных областях интегрирования, на адаптирующихся к искомому численному решению разностных сетках, а также для построения самих генераторов сеток [76,77] и др.

Среди значительного числа численных методов, созданных для решения задач механики сплошных сред, в программном комплексе реализовано всего несколько, удовлетворяющих поставленной в данной работе цели. Простота, эффективность и универсальность – основные критерии, по которым были выбраны численные методики. В наибольшей степени данным требованиям удовлетворяют используемые в пакете программ следующие численные алгоритмы: метод крупных частиц, схема Годунова первого и второго порядка, линеаризованная схема Годунова, метод Мак-Кормака и гибридная конечно-разностная схема с положительным оператором. Подробное описание этих методик приведено в [78-84] и содержащихся там ссылках.

Создание простых и эффективных параллельных алгоритмов является одной из ответственных задач для успешного применения многопроцессорной вычислительной техники [1,25,85,86]. Следует особо отметить взаимное влияние вычислительной архитектуры и параллельных алгоритмов [75,87]. Так, для многопроцессорных вычислительных систем с архитектурой распределенной памяти одним из главных требований является возможность минимизации обмена информацией между процессорами. Дальнейшее развитие вычислительной техники, появление многоядерных процессоров и использование графических плат требует создания логически простых алгоритмов при решении широкого круга практически важных задач.

Центральным вопросом в области параллельного программирования является построение и анализ алгоритмов распараллеливания [85-88]. В [88] подробно рассмотрены теоретические и практические вопросы, связанные с анализом алгоритмов на предмет их возможного распараллеливания. Параллельные алгоритмы в приложении к задачам численной гидродинамики обсуждаются в работе [88]. Наиболее простым и надежным способом распараллеливания в задачах математической физики, а также в вычислительной гидродинамике, является декомпозиция расчетной области на части, обрабатываемые различными процессорами [85-87]. Данный метод применяется для компьютеров с распределенной памятью и позволяет



производить вычисления в своей подобласти на каждом отдельном процессоре в своей локальной памяти.

К настоящему моменту накоплен существенный опыт решения задач вычислительной гидродинамики; разработано значительное количество численных методов для их решения; стремительно развиваются многопроцессорная вычислительная техника и аппарат программного обеспечения [1,25,75]. Все эти факторы стимулируют создание универсальных пакетов программ для решения прикладных задач в этой области. Они как бы являются обобщением знаний и опыта ученых-теоретиков, вычислителей и экспериментаторов, объединением нескольких областей науки, позволяющей с наибольшей эффективностью решать поставленные задачи.

Для эффективного применения пакеты прикладных программ должны содержать в себе не только набор конечно-разностных схем и каталоги математических моделей физических процессов, но и различные модули граничных и начальных условий, массовые силы, уравнения состояния вещества и различные сеточные методики [89-101].

Приведем некоторые наиболее яркие примеры современных отечественных и зарубежных вычислительных комплексов для решения задач механики сплошных сред.

В ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» создан пакет прикладных программ ЛОГОС для моделирования разнообразных процессов аэро-, гидро- и газодинамики. Эффективность его использования во многом опирается на применяемые в пакете современные численные методы на неструктурированных сетках, состоящих из произвольных многогранников. При помощи пакета программ ЛОГОС успешно решены некоторые наиболее важные промышленные задачи для ведущих предприятий авиационной, атомной, автомобильной и космической отраслей [89].

Отечественный пакет программ HSFlow предназначен для моделирования пространственных внешних и внутренних вязких течений при транс-, сверх- и гиперзвуковых скоростях, в том числе, с учётом турбулентности и неравновесных физико-химических процессов. Моделирование основывается на численном решении уравнений Навье-Стокса или Рейнольдса с помощью полностью неявного численного метода конечного объёма третьего порядка аппроксимации по пространству и второго по времени с применением квази-монотонной схемы TVD. HSFlow разработан для работы на высокопроизводительных многопроцессорных супер-ЭВМ кластерного типа. Пакет программ HSFlow позволяет проводить прямое

численное моделирование начальной нелинейной стадии ламинарно-турбулентного перехода при гиперзвуковом обтекании; моделирование неравновесных физико-химических процессов в трёхмерной постановке. В HSFlow реализована 8-ми-компонентная модель атмосферы Марса; моделирование турбулентного пространственного сверхзвукового обтекания на примере спускаемого аппарата проекта EхоMars. Пакет применяется для решения трёхмерных нестационарных осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса с двухпараметрической дифференциальной моделью турбулентности [90].

Отечественная 3D вычислительная программа АВАНГАРД/AVANGARD, созданная в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ», позволяет проводить параллельные вычисления на высокопроизводительных вычислительных системах для упруго-пластических реагирующих течений многокомпонентных и гетерогенных сред, возникающих при детонации гетерогенных взрывчатых веществ, содержащих металлические порошки. Производится расчет всех стадий процесса взрыва от инициирования заряда ВВ до распространения ударной волны в окружающей среде, разлета осколков, перемешивания продуктов детонации с воздухом и их догорания. В зависимости от стадии процесса используются метод SPH или метод Годунова высокого порядка точности. Программа успешно применяется для решения прикладных задач, в том числе, для изучения на мезоуровне процессов распространения ударной волны по многокомпонентной смеси с построением эффективной ударной адиабаты смеси для последующего макро моделирования. Код использует оригинальный приближенный эффективный метод расчета изменения химического состава продуктов взрыва при их расширении и перемешивании с воздухом. Применение этого кода требует решения одного или двух дифференциальных уравнений, не составляющих жесткую систему, и алгебраических уравнений для расчета «квазиравновесного» состава методом экстремума характеристических функций при заданных термодинамических параметрах (удельная внутренняя энергия и удельный объем) и дополнительных соотношениях [91].

Расчеты сложных турбулентных течений в элементах силовых установок летательных аппаратов в зависимости от режима течения проводились с помощью разных ветвей кода Jet3D, созданного на базе ФГУП «ЦИАМ им. П.И.Баранова». Задачи, которые решались с помощью кода Jet3FD можно разбить на три группы: течения в воздухозаборниках разных типов при разных числах Маха набегающего потока с учетом влияния планера летательных

аппаратов; течения в каналах в элементах силовых установок и газодинамическое управление этими течениями; реактивные струи из сопел разной формы [92].

Комплекс программа SigmaFlow – универсальный некоммерческий программный продукт для решения широкого класса задач гидродинамики, тепломассообмена и горения, развиваемый специалистами красноярского филиала института теплофизики СО РАН и кафедры теплофизики Сибирского федерального университета. В комплекс программ SigmaFlow входят модули для: построения геометрии расчетного объекта; создания расчетных сеток; проведения вычислений; анализа результатов моделирования. Программа позволяет выполнять высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах под управлением Windows или Linux операционных систем. Численная методика, заложенная в программу, основывается на методе конечного объема для неструктурированных сеток. Связь между полями скорости и давления реализуется при помощи процедуры расщепления. Системы разностных уравнений решаются итерационным способом с применением многосеточных методов [93].

Программный комплекс NOISEtte [91], разработанный в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН предназначен для газодинамических и аэроакустических расчетов на неструктурированных гибридных сетках. Пространственная аппроксимация обеспечивается семейством экономичных схем повышенного порядка точности. Для анализа особенностей течений используются новая схема на основе метода коррекции потоков; динамически адаптивные сетки с подвижными узлами; автоматический IJK-режим построения реберно-ориентированной схемы; решатели для сверхзвуковых и гиперзвуковых режимов (HLLC, HLLC и др.); улучшения по многоуровневому распараллеливанию. Проведены расчеты по акустике струй, моделированию дефлекторов с применением погруженных граничных условий, гиперзвуковому обтеканию сферы [93].

Для решения задач радиационной плазмодинамики [94] на основе численных методик с применением неструктурированных расчетных сеток для высокопроизводительных параллельных вычислительных систем в ИПМ им.М.В. Келдыша РАН создан пакет прикладных программ MARPLE3D.

Методика КАБАРЕ [96], разработанная в ИБРАЭ РАН, предназначена для решения многих задач, описываемых гиперболической системой уравнений в частных производных. Разностные схемы на основе этой методики отличает второй порядок аппроксимации на неравномерных сетках,

минимальный вычислительный шаблон, малая схемная вязкость. Код ориентирован на расчёт одно- и многокомпонентных трехмерных вязких течений в приближении идеального газа или слабосжимаемой жидкости на неструктурированных гексаэдральных сетках. Опытная эксплуатация проводится в ИБРАЭ РАН на задачах течения жидкометаллического теплоносителя, а также задачах водородной безопасности под контайнментом. В коде SABARET-Stages для решения этих задач дополнительно реализована возможность расчёта детонации и диффузии газов. Второе направление развития – развитие трёхмерного кода на вложенных прямоугольных сетках [96].

Для моделирования трехмерных течений жидкости и газа в технических и природных объектах компанией «ТЕСИС» создан промышленный программный комплекс FlowVision [96]. Комплекс позволяет не только моделировать стационарные и нестационарные, сжимаемые, слабосжимаемые и несжимаемые потоки жидкости и газа, но также проводить высококачественную визуализацию этих течений методами компьютерной графики. Моделируемые при помощи комплекса течения включают в себя стационарные и нестационарные, сжимаемые, слабосжимаемые и несжимаемые потоки жидкости и газа. Сложные движения жидкости, включая течения с горением, с сильной закруткой, а также течения со свободной поверхностью используют для своего решения различные модели турбулентности и адаптивную расчетную сетку. В настоящее время FlowVision развивается в тесном сотрудничестве с ведущими институтами РАН, отраслевыми научно-исследовательскими институтами, российскими и зарубежными промышленными предприятиями и университетами.

Высокоэффективный отечественный код GasDynamicTools предназначен для интегрирования многомерных нелинейных нестационарных задач газовой динамики с учетом многокомпонентности, многофазности, вязкости, теплопроводности, диффузии и химических реакций. Программный код реализован в двумерной (плоской и осесимметричной) и трехмерной постановках [97].

Отметим некоторые зарубежные разработки в области численного моделирования задач механики сплошных сред.

Пакет FLOW 3D разрабатывается компанией Flow Science, Los Alamos и берет свое начало от Манхэттенского проекта по созданию атомной бомбы в США [98]. Многие блоки разработаны в Лос-Аламосской национальной лаборатории. Пакет основан на методе конечных элементов, с

соответствующими этому методу преимуществами и недостатками. Пакет в основном ориентирован на решение задач несжимаемой гидродинамики, хотя имеет и возможности для анализа ударно-волновых течений.

Аналогичное происхождение и используемый метод у пакета LS-DYNA компании Livermore Software Technology Corporation [99]. Свои корни пакет берет из Ливерморской национальной лаборатории США. Оба пакета в основном ориентированы на использование на многопроцессорных рабочих станциях и суперкомпьютерах, хотя имеются версии и для персональных компьютеров.

Наиболее популярной у специалистов в сфере автоматизированных инженерных расчётов (Computer-Aided Engineering) решения стационарных и нестационарных, линейных и нелинейных, пространственных задач механики конструкций и механики деформируемого твёрдого тела, задач механики жидкости и газа, электродинамики, теплопередачи, теплообмена и акустики является американская программная система ANSYS [100], существующая и развивающаяся на протяжении последних 30 лет. Моделирование и анализ с использованием программной системы ANSYS позволяет избежать длительных и дорогостоящих этапов разработки: «проектирование – изготовление – испытания». Отдельное направление ANSYS CFX является программным комплексом, входящим в систему ANSYS и нацеленным на численное моделирование гидрогазодинамических процессов, многофазных потоков, горения, химической кинетики и радиационного теплообмена. За счет наличия прямого интерфейса к большинству CAD систем и возможности проводить соответствующий структурный анализ совместно с ANSYS Multiphysics направление ANSYS CFX обеспечивает высочайший уровень решения задач вычислительной гидрогазодинамики. При этом добиться высокой точности результатов при решении различного класса задач при использовании ANSYS CFX позволяет наличие широкого выбора моделей турбулентности в сочетании с линейным решателем с технологией «Algebraic Coupled Multigrid».

С 2006 года программный пакет FLUENT [101] также входит в состав программного комплекса ANSYS. Он нацелен на моделирование сложных течений жидкостей и газов с широким диапазоном свойств, обеспечивает оптимальную эффективность и точность решения для широкого диапазона моделируемых скоростных режимов посредством обеспечения различных параметров моделирования и использования многосеточных методов с улучшенной сходимостью. Наличие большого количества физических

моделей в пакете FLUENT позволяет с высокой точностью моделировать ламинарные и турбулентные течения, различные режимы теплопереноса, многофазные потоки, химические реакции, и иные физические задачи с применением гибкости сеток и их адаптации на основе получаемого решения. Пакет основан на методе конечных объемов (finite volume) и имеет большое разнообразие встроенных моделей физических процессов. Отметим, что пакет FLUENT по достоинству оценен мировым научным сообществом и имеет рекордное количество пользователей в мире.

Несмотря на то, что в настоящее время не вызывает сомнения эффективность использования коммерческих пакетов программ, применимость реализованных в них физико-математических моделей для решения разнообразных задач иногда вызывает обоснованные сомнения и может составлять тему отдельного исследования. Поэтому научные изыскания в этом направлении продолжаются и еще далеко не окончены.

В мире насчитывается несколько десятков тысяч различных газодинамических пакетов. Большинство из них эффективно может использоваться в ограниченных областях, часто они не имеют развитой системы представления данных и интерфейса пользователя. Численное моделирование, основанное на использовании данных программных продуктов, применяется в основном в коммерческих целях в аэрокосмической, автомобильной, энергетической, нефтяной и других отраслях. Большинство этих комплексов позволяют качественно решать многие промышленные задачи, но при этом не предоставляют пользователю возможность вносить коррекцию, дополнения и усовершенствования в программный код. При этом указанные пакеты программ часто не являются расширяемыми и обычно используют ограниченное количество численных методов, что не позволяет пользователю сравнить возможности различных вычислительных методик и сделать выбор в пользу наиболее подходящей для исследуемой задачи. Зачастую лицензионные и иные условия, выставляемые авторами пакетов, содержат серьезные (в том числе временные) ограничения, сдерживающие возможности заказчиков по их применению и развитию.

При проведении прикладных фундаментальных исследований требуется более гибкий подход к созданию вычислительного комплекса, позволяющий, например, вносить изменения в разностные схемы и усовершенствовать модели описания конкретных явлений. Как мы уже отмечали [79], к настоящему времени не создано универсальной численной методики для расчета всех встречающихся в природе течений жидкости и газа.

Для исследования каждого класса конкретных явлений обычно разрабатывается оптимальный численный метод. Кроме того, использование коммерческих пакетов вычислительной механики жидкости и газа, не всегда позволяет получить адекватное решение. В ряде случаев можно обнаружить, что решение «разваливается», и для применения пакета приходится специальным образом настраивать начальные и граничные условия, а также эмпирически подбирать такие параметры, как шаг по времени, количество итераций для разрешения уравнений неявной схемы, критерий сходимости и т. п. Также большинство пакетов прикладных программ не настолько гибки, как необходимо исследователям. Зачастую пакеты не являются переносимыми и их сложно интегрировать с другими программами, что часто бывает необходимо с прикладной точки зрения. В связи с тем, что современная вычислительная техника и аппаратные средства постоянно предлагают новые программные технологии, позволяющие объединить различные численные методики и проводить сопоставление результатов моделирования конкретного физического процесса в рамках одного программного продукта. Многие исследователи опираются на свой собственный опыт и создают собственные программы, настроенные на эффективное решение заданного круга задач.

В данной диссертации представлен исследовательский комплекс прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** [79,80], ориентированный на решение задач механики сплошных сред, описываемых системой уравнений гиперболического типа. При помощи данного пакета численно исследованы следующие задачи: трехмерные вихревые явления в газо- и гидродинамике; процессы, происходящие при высокоскоростном соударении металлических пластин; воздействие ультракоротких лазерных импульсов на металлические мишени; возникновение обратного вихревого каскада в 2D турбулентности при постоянном воздействии внешней силы.

Для решения обсуждаемых здесь задач различной физической природы пакет предоставляет пользователю несколько численных методик (в том числе, разработанный линеаризованный вариант метода Годунова с гарантированным свойством неубывания энтропии), программные блоки, содержащие специфические для задач начальные, граничные условия, внешние силы и различные уравнения состояния вещества. Пакет является расширяемым программным продуктом. Он позволяет пользователю внедрять свои собственные разработки в программный код, может использоваться на персональных компьютерах и компьютерах массиво-параллельной архитектуры.

Исследовательский пакет программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** создан для научных работников и предназначен для проведения вычислительных экспериментов. Особым фактором успешного применения исследовательского пакета программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** для решения конкретной задачи является возможность его массового использования на персональных компьютерах с последующим переносом кода на супер ЭВМ. Разработка подобного пакета позволяет значительно сократить время решения задачи на этапе тестирования математической модели и подбора эффективного численного алгоритма, а также является инструментом для проведения экспертных расчетов качественного характера.

Отметим, что точность и достоверность результатов моделирования в настоящее время определяются не только погрешностями в решении дифференциальных уравнений, выражающих законы сохранения, но и, не в меньшей мере, погрешностями в УРС рассматриваемой среды. Поэтому для успешного моделирования необходимо иметь современные широкодиапазонные УРС. Одним из достоинств исследовательского пакета программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** является то, что он содержит вычислительный блок с различными УРС, что позволяет проводить вычислительный эксперимент в широком диапазоне параметров и максимально точно приблизиться к натурному эксперименту.



## ГЛАВА 2 ТЕХНОЛОГИЯ ОРГАНИЗАЦИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ, ОПИСЫВАЕМЫХ СИСТЕМАМИ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

Данная глава посвящена описанию технологии построения комплекса программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** для решения задач механики сплошных сред, описываемых системами уравнений гиперболического типа. Описан способ формализации постановок физических задач и численных методов их решения путем настройки универсальной методики на конкретные параметры задачи. Пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** тестировался на платформах Intel, Param, MBC-1000 с ОС Windows, Solaris, Linux. Представленная методика имеет государственную регистрацию программ для ЭВМ № 2013618035.

При работе над данным разделом диссертации использована следующая публикация автора, в которой, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования: Фортова С. В., Крагинский Л. М., Чикиткин А.В., Опарина Е.И., Программный пакет для решения гиперболических систем уравнений // Математическое моделирование. – 2013, том 25, № 5, с. 123-135.

### 2.1 Предмет исследования

Многие задачи гидродинамики описываются системой нелинейных уравнений в частных производных гиперболического типа [1,25]. Большинство из них могут быть решены только численными методами.

В данной главе предложен универсальный подход к численному решению задач этого типа путем объединения возможностей различных численных методик и постановок задач в единый комплекс программ (солвер) применительно к параллельным суперкомпьютерным архитектурам. В данном подходе различные части методики (численный метод, граничные и начальные условия, массовые силы и уравнения состояния вещества) представляют собой независимые программные блоки солвера, которые в зависимости от конкретной постановки задачи включаются в результирующую программу.

Как известно, в настоящее время еще не разработана универсальная численная методика решения для всего многообразия задач, описываемых гиперболической системой уравнений [9-25]. Однако, оказывается возможным выделить несколько направлений, объединяющих данные задачи для

единообразного решения.

Во-первых, для их решения используются схожие численные методики и подходы [15-25]. При этом одни методики лучше работают для определенных задач или, например, совсем не работают для других задач. В обзоре основных вычислительных подходов для задач гиперболического типа, представленном в Главе 1, выделены наиболее эффективные, на взгляд автора, численные схемы для решения конкретных физических задач, рассмотренных в Главах 5-8 данной диссертации.

Во-вторых, существует большое число программ, библиотек и пакетов, реализующих системные функции, элементы методики и физическую специфику задачи. Поэтому логичным является не только использование встроенных в разрабатываемый пакет программ численных методик и постановок задач, но и возможность легко заменять различные части этих методик, реализовывать новые методы и пользоваться внешними пакетами и программами.

В-третьих, для эффективной работы программы на параллельных компьютерах необходимо, чтобы различные части общей методики были написаны на последовательном коде, а параллельная часть реализовывалась отдельным блоком. Такой подход позволяет легко и быстро разрабатывать те части программы, которые отвечают за постановку задачи и численные схемы.

В данной Главе предлагается единая технология построения пакета прикладных программ для решения задач, описываемых гиперболической системой уравнений, и учитывающая перечисленные выше особенности. Для этого обобщены, формализованы и объединены в единый программный комплекс различные численные методики; граничные и начальные условия; внешние силы и уравнения состояния вещества. Основной принцип разрабатываемой технологии состоит в том, чтобы выделить ядро, остающееся неизменным, к которому по определенному интерфейсу можно было бы подключать программные блоки (как стандартные, так и реализуемые пользователем), необходимые для решения физической задачи [79,80]. В сущности, идея использования всего комплекса разработанных программных модулей для решения задач сформулирована академиком А.А. Самарским [1]: «Мощные компьютеры, высокоэффективные вычислительные алгоритмы, современное программное обеспечение позволяют в настоящее время организовать научные исследования в рамках единой технологии вычислительного эксперимента, который включает в себя теоретические и экспериментальные исследования».

Кроме того, по мнению академика Б.Н. Четверушкина [75]: «Будущий прогресс вычислительных систем будет определяться, как развитием и появлением средств выполнения вычислений, включая их техническую реализацию и появления новых физических идей, лежащих в их основе, так и развитием новых подходов и идей в прикладной математике. Не исключено, что эти принципиально новые направления вычислительной математики будут широко использовать базовые знания из смежных областей науки физики и механики».

Таким образом, представляется актуальным создание такого программного продукта, в рамках которого можно было бы использовать различные численные методики, физические модели и применять внешние программы и пакеты. Кроме того, требуется, чтобы программа работала на параллельных компьютерах, была эффективной, но при этом могла использовать программные блоки с последовательным (не параллельным) кодом. При этом удобна такая реализация параллельной части программы внутри ядра, при которой строительные блоки имеют последовательный характер выполнения, и программисты, реализующие расчетные методики, не занимаются дополнительно еще и задачами распараллеливания.

Учитывая вышеперечисленные особенности, академиком О.М. Белоцерковским была поставлена задача построения единой технологии для решения всевозможных задач с системой уравнений гиперболического типа. Такая технология была разработана и реализована в виде переносимого программного кода для параллельных компьютеров [78-80]. Особенностью данного программного продукта является возможность включения различных солверов в рамках одной формализации, использование различных численных методик, применение различных граничных и начальных условий. В том числе, есть возможность подключать по описанному интерфейсу новые программные блоки, новые солверы, специфические для задачи граничные условия, внешние силы и уравнения состояния вещества.

Итак, для реализации данной концепции необходимо:

- 1) Формализовать постановку задачи численного моделирования, чтобы учесть как можно больше возможных требований пользователей.
- 2) В рамках данной формализации требуется построить унифицированную методику, включающую в себя все необходимые методы.
- 3) Реализовать изложенный подход в программном комплексе для решения задач различного типа на параллельных компьютерах.

## 2.2 Основные направления формализации подхода

Особенностью уравнений гиперболического типа является конечная скорость распространения возмущений в области вычислений и наличие характеристических линий и поверхностей, ограничивающих область влияния решений. При переходе к характеристическим переменным решение системы гиперболических уравнений сводится к решению нескольких уравнений переноса [1,25,75]. Данный факт является основополагающим при написании основной части численных схем в разработанном пакете программ.

Продемонстрируем это на примере системы одномерных гиперболических уравнений:  $\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0$ . Запишем систему уравнений в следующем виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0,$$

где  $\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Q}}$  – матрица Якоби. Поскольку система уравнений является гиперболической, то заменой координат матрица  $\mathbf{A}$  может быть приведена к диагональному виду.

Введем обозначения  $\mathbf{l}_k$  и  $\mathbf{r}_k$  для левых и правых собственных векторов матрицы  $\mathbf{A}$ , которые соответствуют собственным значениям  $\lambda_k$ ,  $k = 1..n$ :  $\mathbf{l}_k^T \mathbf{A} = \lambda_k \mathbf{l}_k^T$ ,  $\mathbf{A} \mathbf{r}_k = \lambda_k \mathbf{r}_k$ , или, в матричной форме:

$$\mathbf{\Omega} \mathbf{A} = \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Omega}, \quad \mathbf{A} \mathbf{\Omega}^{-1} = \mathbf{\Omega}^{-1} \mathbf{\Lambda}, \quad (2.1)$$

где  $\mathbf{\Omega}^T = \{\mathbf{l}_1 \dots \mathbf{l}_n\}$ ,  $\mathbf{\Omega}^{-1} = \{\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n\}$ , и  $\mathbf{\Lambda} = \{diag(\lambda_k)\}$  – матрица, содержащая собственные значения по главной диагонали, и нули в качестве остальных элементов. Если  $\mathbf{A} = \text{const}$ , то исходная система уравнений (после умножения слева на  $\mathbf{\Omega}$ ) может быть представлена в форме:

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial \alpha_k}{\partial x} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} = 0, \quad \text{где } \alpha_k = \mathbf{l}_k^T \mathbf{Q}, \quad k = 1..n \quad \text{и} \quad \mathbf{a} = \mathbf{\Omega} \mathbf{Q}. \quad (2.2)$$

Система распадается на  $n$  линейных уравнений переноса, каждое из которых соответствует своей характеристике и решается одним из численных методов, предложенных в пакете прикладных программ.

Система уравнений в частных производных гиперболического типа в пространственном случае может быть записана в виде

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}^y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{F}^z}{\partial z} = \mathbf{G} \quad \text{или} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} + \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial y} + \mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial z} = \mathbf{G}, \quad (2.4)$$

где  $\mathbf{Q}$  – вектор основных расчетных переменных,  $x, y, z$  – любые независимые координаты в области,  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$  – матрицы (порядка  $N$ , где  $N$  – число компонент вектора  $\mathbf{Q}$ ) Якоби функций  $\mathbf{F}^x, \mathbf{F}^y, \mathbf{F}^z$ , определяющих потоки  $\mathbf{Q}$  по каждому координатному направлению. Кроме расчетных компонент могут быть также заданы  $K$  дополнительных компонент  $\mathbf{P}$ , определяющих неоднородные в пространстве физические свойства среды (в данной точке). В общем случае матрицы  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$  могут зависеть не только от координат  $x, y, z$ , но и от переменного во времени поля  $\mathbf{P}$ , и от вектора решения  $\mathbf{Q}$  [78].

Большинство практических задач рассматриваются в пространственной постановке. Поэтому для сведения пространственной задачи к решению системы одномерных уравнений применяется **метод расщепления** по физическим процессам и пространственным переменным [76]. Основным предположением в формулировке данного метода является то, что все моделируемые процессы и потоки по различным пространственным переменным не зависят. Метод заключается в последовательном вычислении влияния каждого из физических факторов и потоков при условии, что все остальные факторы отсутствуют или заморожены. На каждом временном шагу решается 3 гиперболических уравнения и учитывается при наличии правая часть:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}'}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^x(\mathbf{Q}')}{\partial x} = 0, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{Q}''}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^y(\mathbf{Q}'')}{\partial y} = 0, \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{Q}'''}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^z(\mathbf{Q}''')}{\partial z} = 0, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{Q}''''}{\partial t} = \mathbf{G}. \quad (2.8)$$

Выбор начальных условий для каждого из этих уравнений и вычисление результирующих компонент  $Q^{n+1}$  по  $Q'$ ,  $Q''$ ,  $Q'''$ ,  $Q''''$  и  $Q^n$  параметризуются.

Можно использовать различные варианты расщепления:

- Отсутствие расщепления –  $Q'$ ,  $Q''$ ,  $Q'''$  и  $Q''''$  вычисляются на основе значений компонент  $Q^n$  с предыдущего временного шага.
- Обычное расщепление [102]. В этом случае  $Q'$  вычисляется на основе  $Q^n$ ,  $Q''$  – на основе  $Q'$ ,  $Q'''$  – на основе  $Q''$ ,  $Q''''$  – на основе  $Q'''$ , далее полагаем  $Q^{n+1} = Q''''$ .
- Расщепление Странга [103] со сменой порядка итераций. В случае обычного расщепления решение  $Q^{n+1}$  аппроксимирует решение исходной системы на следующем временном шаге только с первым порядком точности, даже, если на каждом шаге реализуется второй порядок или выше. Меняя порядок шагов по направлениям  $x$ ,  $y$  и  $z$  при вычислении потоков, можно сохранить второй порядок аппроксимации, например, циклически в следующем порядке:  $xuz$ ,  $uxz$ ,  $zxy$ ,  $xzy$ ,  $uzx$ ,  $zux$ .

В методах потокового расщепления часто используют представление потоков  $\mathbf{F}$  в виде комбинации двух потоков  $\mathbf{F} = F(\mathbf{F}^+, \mathbf{F}^-)$ , которые часто рассматриваются как поток вперед  $\mathbf{F}^+$  и назад  $\mathbf{F}^-$ . Тогда,

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{F}^+} \frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{F}^-} \frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial x} = 0 \quad (2.9)$$

Обозначим 
$$\mathbf{A}^\pm = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{F}^\pm} \frac{\partial \mathbf{F}^\pm}{\partial Q}, \quad \Lambda^\pm = \Omega \mathbf{A}^\pm \Omega^{-1}.$$

Тогда (2.10)

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \mathbf{A}^+ \frac{\partial Q}{\partial x} + \mathbf{A}^- \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad \text{или} \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \Lambda^+ \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} + \Lambda^- \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} = 0 \quad (2.12)$$

Наиболее известным методам потокового расщепления является **расщепление по характеристическим переменным Стигера-Уорминга** [65]. Для его применения необходимо выделить характеристики с положительными и

отрицательными собственными числами и использовать формулу (2.12), где:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^+ + \mathbf{F}^-, \quad \Lambda^\pm = \{diag(\lambda_k^\pm)\}, \quad \lambda_k^\pm = \frac{\lambda_k \pm |\lambda_k|}{2}. \quad (2.13)$$

**Расщепление по характеристическим переменным ван Лира** [104] основано на рассмотрении ансамбля псевдочастиц, распределенных по определенному закону (в случае уравнений Эйлера используется Больцмановское распределение). В данном случае все псевдочастицы делятся на два класса и рассчитываются суммарные потоки псевдочастиц каждого класса. Для уравнений Эйлера с компонентами  $(\rho^s, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E)$ :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^+ + \mathbf{F}^-,$$

для  $|u| \geq c$ :  $\Lambda^\pm = \Lambda_{Steger-Warming}^\pm$ , (2.14)

$$\text{для } |u| \leq c: f_{\rho^s}^\pm = \pm \rho^s \frac{(u \pm c)^2}{4c}, \quad f_\rho^\pm = \sum_s f_{\rho^s}^\pm, \quad f_{\rho u}^\pm = f_\rho^\pm \frac{(\gamma - 1)u \pm 2c}{\gamma}, \quad f_{\rho v}^\pm = f_\rho^\pm v,$$

$$f_{\rho w}^\pm = f_\rho^\pm w, \quad f_{\rho E}^\pm = f_\rho^\pm \left( \frac{((\gamma - 1)u \pm 2c)^2}{2(\gamma^2 - 1)} + \frac{v^2 + w^2}{2} \right). \quad (2.15)$$

Преимуществом данного типа расщепления является то, что потоки  $\mathbf{F}^+$  и  $\mathbf{F}^-$

$$M = \frac{|u|}{c}$$

гладко зависят от числа Маха

**MUSCL-подход** использует пространственное расщепление по расчетным переменным [51,104], который заключается в использовании тех же формул для расщепления потоков, что и в расщеплении Стигера-Уорминга  $\mathbf{F}^\pm = \mathbf{F}_{Steger-Warming}^\pm$  (или любого другого расщепления по характеристическим

переменным), но использует аппроксимацию для  $\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x}$  вместо  $\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x}$ , что весьма важно для нелинейных задач. В этом случае вычисления производятся по формуле, являющейся промежуточной между (2.11) и (2.12):

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} + \Lambda^+ \left( \mathbf{\Omega} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} \right) + \Lambda^- \left( \mathbf{\Omega} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} \right) = 0 \quad (2.16)$$

Способы расщепления представлены в пакете программ отдельными блоками и выбираются пользователем самостоятельно.

Для численного решения уравнения переноса  $f_t + \lambda f_x = 0$  пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** предлагает различные численные методы, в том числе приближенные Римановские методы [54] и гибридные методы [16]. Все рассматриваемые в пакете прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** численные методы могут быть записаны в консервативном виде, являющимся конечно-разностной аппроксимацией уравнения переноса:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{\tau}{h} (\lambda f_{i+1/2} - \lambda f_{i-1/2}), \quad (2.17)$$

где вычисление потока  $F_{i+1/2} = \lambda f_{i+1/2}$  зависит от метода. Шаг по времени  $\tau$

выбирается из условия Куранта  $\frac{\tau|\lambda|}{h} = C \leq 1$ .

В некоторых методах требуется аппроксимировать значения  $\bar{f}_i, \bar{f}_{i+1}, \dots$ , поэтому в общем случае будем вычислять поток как функцию от уже аппроксимированных значений переменных  $F_{i+1/2} = Flux(\bar{f}_i, \bar{f}_{i+1}, \dots)$ . Кроме того, характеристические переменные  $\alpha$ , матрицы **A**, **B**, **C**, их собственные значения  $\Lambda$  и матрицы перехода  $\Omega$  и  $\Omega^{-1}$  от одних переменных к другим требуется вычислять в полужелтых точках шаблона (при линейном приближении нелинейного уравнения используются значения на границах ячеек:  $F_{i+1/2} = \lambda_{i+1/2} f_{i+1/2}$ ). Поскольку на границах компоненты не заданы, требуется выбрать вариант интерполяции с соседних ячеек на границу. Будем называть эту операцию осреднением (отличая ее от аппроксимации основных переменных в целых точках).

Для уравнений Эйлера часто используется осреднение Роу [56]. Обозначим  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_{i+1})$  функцию осреднения матрицы Якоби, а саму матрицу Якоби  $\mathbf{A}_{i+1/2} = \mathbf{A}(\mathbf{Q}_{i+1/2})$ . К алгоритму интерполяции предъявляются следующие требования:

- сходимости:  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_{i+1}) \rightarrow \mathbf{A}_{i+1/2}$  при  $\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_{i+1} \rightarrow \mathbf{Q}_{i+1/2}$ , (2.18)

- консервативности:  $\mathbf{F}_{i+1} - \mathbf{F}_i = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_{i+1}) \cdot (\mathbf{Q}_{i+1} - \mathbf{Q}_i)$ , (2.19)

- невырожденности: матрица  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_{i+1})$  - всегда диагонализируема.



Рой [56] было показано, что такое осреднение существует и единственно. Для уравнений Эйлера многокомпонентной среды оно выглядит так:

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho_i \rho_{i+1}}, \quad (2.20)$$

$$\tilde{\psi}^s = \frac{\sqrt{\rho_i} \psi_i^s + \sqrt{\rho_{i+1}} \psi_{i+1}^s}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}}, \quad (2.21)$$

$$\tilde{u} = \frac{\sqrt{\rho_i} u_i + \sqrt{\rho_{i+1}} u_{i+1}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}}, \quad (2.22)$$

$$\tilde{v} = \frac{\sqrt{\rho_i} v_i + \sqrt{\rho_{i+1}} v_{i+1}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}}, \quad (2.23)$$

$$\tilde{w} = \frac{\sqrt{\rho_i} w_i + \sqrt{\rho_{i+1}} w_{i+1}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}}, \quad (2.24)$$

$$\tilde{H} = \frac{\sqrt{\rho_i} H_i + \sqrt{\rho_{i+1}} H_{i+1}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}}, \quad (2.25)$$

где  $\rho$  – общая плотность,  $\psi^s = \rho^s / \rho$  – концентрации компонент,  $H$  – энтальпия.

Описанные методы аппроксимации и осреднения представлены в пакете прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** и могут быть выбраны пользователем самостоятельно [79,80].

### ГЛАВА 3 РАЗРАБОТКА ЧИСЛЕННЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ, ОПИСЫВАЕМЫХ СИСТЕМАМИ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

В данной главе представлены численные схемы, реализованные в пакете прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**. Особое внимание уделено описанию и исследованию линеаризованной редакции классической схемы Годунова с нелинейными распадами разрывов в одномерном варианте. Экспериментально показано, что данный вариант схемы обладает свойством гарантированного неубывания энтропии, позволяющим моделировать её рост на ударных волнах. Исследована структура ударных волн после распадов разрывов. Установлены зависимости ширины ударных волн и времени их формирования от выбора числа Куранта. Приведены результаты проверки точности разрывных решений.

При работе над данным разделом диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования:

- Годунов С.К., Ключинский Д.В., Фортова С.В., Шепелев В.В., Экспериментальные исследования разностных моделей газовой динамики с ударными волнами // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2018, том 58, № 8, с. 5-19.
- Godunov S.K., Klyuchinskiy D.V., Safronov A.V., Fortova S.V., Shepelev V.V., Experimental study of numerical methods for the solution of gas dynamics problems with shock waves // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 946, № 012048.
- Годунов С.К., Денисенко В.В., Ключинский Д.В., Фортова С.В., Шепелев В.В., Исследование энтропийных свойств линеаризованной редакции метода Годунова // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2020, том 60, № 4, с. 639-651.

#### 3.1 Численные методики исследования

В рамках технологии, предложенной в Главе 2, можно использовать любую конечно-разностную схему для уравнения переноса. Применяемые в пакете программ конечно-разностные схемы условно можно условно разбить на два класса: приближенные Римановские методы и гибридные схемы.

**Приближенные Римановские солверы.** Данный подход основан на решении задачи Римана в двух соседних ячейках, значения компонент в пределах одной ячейки полагаются постоянными. В отличие от метода Годунова [43] задача Римана в данном случае решается не точно (что потребовало бы очень много вычислений), а приближенно. Приближение первого порядка достигается формулой Куранта-Изаксона-Рисса [32] вычисления значений  $F_{i+1/2}$  с разностями против потока:

$$F_{i+1/2} = \frac{1}{2}\lambda(f_{i+1} + f_i) - \frac{1}{2}|\lambda|(f_{i+1} - f_i) = \begin{cases} \lambda f_i & / \lambda \geq 0 \\ \lambda f_{i+1} & / \lambda < 0 \end{cases}, \quad (3.1)$$

$$f_i^{n+1} = \begin{cases} f_i^n - \frac{\tau}{h}(\lambda f_i - \lambda f_{i-1}) & / \lambda \geq 0 \\ f_i^n - \frac{\tau}{h}(\lambda f_{i+1} - \lambda f_i) & / \lambda < 0 \end{cases}. \quad (3.2)$$

Схемы ROE2 Роу [55], TVD2 Хартена [58], UNO3 Янга [105] и др. за счет включения дополнительных членов повышают порядок схемы и контролируют монотонность. В обобщенной схеме Роу [55] расширение этой схемы до второго порядка точности производится за счет введения так называемой функции ограничения потока  $B^k$ . Схема в этом случае выглядит так:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}) - \frac{1}{2} \sum_k \alpha^k |\tilde{\lambda}^k| \tilde{\mathbf{e}}_k + \frac{1}{2} \sum_k \alpha^k B^k (1 - C^k) |\tilde{\lambda}^k| \tilde{\mathbf{e}}_k. \quad (3.3)$$

Здесь  $C^k = \frac{|\tilde{\lambda}^k| \tau}{h}$  – число Куранта для данной волны;  $\tilde{\lambda}^k$  и  $\tilde{\mathbf{e}}_k$  – собственные числа и вектора матрицы  $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ , осуществляющей переход к характеристическим переменным и приводящей осредненную матрицу Якоби  $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}_{i+1/2}$  к диагональному виду  $\tilde{\mathbf{A}} = \tilde{\mathbf{\Omega}}^{-1} \tilde{\mathbf{\Lambda}} \tilde{\mathbf{\Omega}}$ ;  $\mathbf{a}_{i+1/2} = \tilde{\mathbf{\Omega}}(\mathbf{Q}_{i+1} - \mathbf{Q}_i)$  – вектор разностей характеристических переменных.

В тех частях области, где течение гладкое,  $B^k \rightarrow 1$ , и схема превращается в известную схему Лакса-Вендроффа [36], имеющую второй порядок аппроксимации:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}) - \frac{1}{2} \sum_k \alpha^k C^k |\tilde{\lambda}^k| \tilde{\mathbf{e}}_k. \quad (3.4)$$

Там же, где течение имеет разрывы,  $B^k \rightarrow 0$ , и схема вырождается в указанную схему первого порядка, имеющую свойство монотонности. Таким образом, функции ограничения потока  $B^k$  как бы переключают схемы с разными свойствами в зависимости от характера потока.

В качестве ограничителя  $B^k$  пакет программ предлагает использовать следующие функции [49,56,58,61]:

$$B_{\text{MinMod}}^k(r^k) = \max(0, \min(1, r^k)) , \quad (3.5)$$

$$B_{\text{SuperBee}}^k(r^k) = \max(0, \min(1, 2r^k), \min(2, r^k)) , \quad (3.6)$$

$$B_{\text{Collela-Woodward}}^k(r^k) = \max(0, \min(2, 2r^k, \frac{1+r^k}{2})) , \quad (3.7)$$

$$B_{\text{vanLeer}}^k(r^k) = \max\left(0, \frac{2r^k}{1+r^k}\right) , \quad (3.8)$$

$$B_{\text{vanAlbada}}^k(r^k) = \max\left(0, \frac{r^k(1+r^k)}{1+(r^k)^2}\right) , \quad (3.9)$$

$$B_{\text{Kolgan}}^k(r^k) = \text{argvalue } \text{MinMod}\left(1, r^k, \frac{1+r^k}{2}\right) , \quad (3.10)$$

$$B_{\text{UNO2}}^k(r_{-1/2}^k, r_{-3/2}^k, r_{+3/2}^k) = \text{MinMod}\left(1 - \frac{1}{2} \text{MinMod}\left(\frac{1-r_{-1/2}^k}{\Delta x_i}, \frac{r_{+3/2}^k - 1}{\Delta x_{i+1}}\right), \right. \\ \left. r_{-1/2}^k + \frac{1}{2} \text{MinMod}\left(\frac{1-r_{-1/2}^k}{\Delta x_i}, \frac{r_{-1/2}^k - r_{-3/2}^k}{\Delta x_{i-1}}\right)\right) , \quad (3.11)$$

$$B_{\text{sharp}}^k(r^k) = \begin{cases} \max(0, \min(2r^k, \frac{2}{3} + \frac{1}{3}r^k)) & | r^k \leq 2 \\ 2 & | r^k > 2 \end{cases} , \quad (3.12)$$

где  $r^k = r_{-1/2}^k$ ,  $r_{-s}^k = \frac{\alpha_{\text{upwind}, -s}^k}{\alpha_{i+1/2}^k}$  – отношение амплитуд  $k$ -ой волны в точке расчета потока и в точках со стороны набегающей волны:

$$\alpha_{\text{upwind}, -s}^k = \begin{cases} \alpha_{i-s}^k & | \lambda_{i+1/2}^k \geq 0 \\ \alpha_{i+1+s}^k & | \lambda_{i+1/2}^k < 0 \end{cases} . \quad (3.13)$$

В данной записи процедура искусственного сжатия в общем виде выглядит так: вместо ограниченных разностей  $\alpha^k B^k(r^k)$  используются модифицированные разности  $\alpha^k \text{Compress}(B^k, r^k, \alpha^k)$ . Функционал *Compress* подбирается таким образом, чтобы сузить те места, где подозреваются разрывы в решении, уменьшив таким образом их «размазывание» по области. Один из часто применяемых вариантов искусственного сжатия – использование вместо  $r^k$  скорректированного отношения  $r_{ACM}^k = b^k r^k$  [71]:

$$\text{Compress}(B^k, r^k) = \frac{1-\varphi}{2} b^k B^k\left(\frac{r^k}{b^k}\right) + \frac{1+\varphi}{2} B^k(b^k r^k) \quad (3.14)$$

Для коэффициента  $b^k$  используются значения 1.5, 2, 4, выбор  $\varphi$  определяет свойства схемы, так при  $\varphi=1/3$  одномерная схема будет иметь третий порядок аппроксимации по пространству [87].

Энтропийная коррекция заключается в использовании модифицированных собственных значений. Наиболее употребительными являются корректор Хартена [58]:

$$\psi_{Harten}^k(\lambda) = \begin{cases} \lambda^k & / \quad |\lambda^k| \geq \delta^k \\ \text{sgn}(\lambda^k) \cdot \frac{(\lambda^k)^2 + (\delta^k)^2}{2\delta^k} & / \quad |\lambda^k| < \delta^k \end{cases} \quad (3.15)$$

и корректор Роу [71, 78]:

$$\psi_{Roe}^k(\lambda^k) = \text{sgn}(\lambda^k) \cdot \frac{|\lambda^k + \delta^k| + |\lambda^k - \delta^k|}{2} \quad (3.16)$$

К различным характеристическим компонентам можно применять различные параметры искусственного сжатия и различные функции-ограничители. Так для контактного разрыва в газодинамике и разрыва Альфвена в магнитной гидродинамике применяются бóльшие коэффициенты сжатия и более компрессирующие ограничители, например, *SuperBee*. Энтропийную коррекцию же напротив стоит делать только для звуковых волн. Эти действия можно включать и выключать соответствующими параметрами, так  $b^k = 1$  означает отсутствие сжатия, а  $\delta^k = 0$  – отсутствие энтропийной коррекции.

Схемы TVD2 и UNO3 можно записать в подобном виде [105]:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1} + \mathbf{\Omega}_{i+1/2}^{-1} \mathbf{\Phi}_{i+1/2}), \quad (3.17)$$

где элементы  $\phi_{i+1/2}^k$  вектора  $\mathbf{\Phi}_{i+1/2}$  имеют вид

в случае TVD2:

$$\phi_{i+1/2}^k = \sigma(\lambda_{i+1/2}^k) (\beta_i^k + \beta_{i+1}^k) - \psi(\lambda_{i+1/2}^k + \gamma_{i+1/2}^k) \alpha_{i+1/2}^k, \quad (3.18)$$

а в случае UNO3:

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2}^k &= \sigma(\lambda_{i+1/2}^k) (\beta_i^k + \beta_{i+1}^k) \\ &+ \begin{cases} \tilde{\sigma}(\lambda_{i+1/2}^k) (\tilde{\beta}_i^k + \tilde{\beta}_{i+1}^k) - \psi(\lambda_{i+1/2}^k + \gamma_{i+1/2}^k + \tilde{\gamma}_{i+1/2}^k) \alpha_{i+1/2}^k & | |\alpha_{i-1/2}^k| \leq |\alpha_{i+1/2}^k| \\ \hat{\sigma}(\lambda_{i+1/2}^k) (\hat{\beta}_i^k + \hat{\beta}_{i+1}^k) - \psi(\lambda_{i+1/2}^k + \gamma_{i+1/2}^k + \hat{\gamma}_{i+1/2}^k) \alpha_{i+1/2}^k & | |\alpha_{i-1/2}^k| > |\alpha_{i+1/2}^k| \end{cases}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

где

$$\sigma(\lambda) = \frac{1}{2} (\psi(\lambda) - C\lambda^2), \quad \tilde{\sigma}(\lambda) = \frac{1}{6} (2|\lambda| - 3C|\lambda|^2 + C^2|\lambda|^3), \quad \hat{\sigma}(\lambda) = \frac{1}{6} (C^2|\lambda|^3 - |\lambda|), \quad (3.20)$$

$$\beta_i^k = \mathbf{m}(\alpha_{i+1/2}^k, \alpha_{i-1/2}^k), \quad (3.21)$$

$$\tilde{\beta}_i^k = \overline{\mathbf{m}}(\Delta_- \alpha_{i-1/2}^k, \Delta_+ \alpha_{i-1/2}^k) \quad | \quad |\alpha_{i-1/2}^k| \leq |\alpha_{i+1/2}^k|, \quad (3.22)$$

$$\hat{\beta}_i^k = \overline{\mathbf{m}}(\Delta_- \alpha_{i+1/2}^k, \Delta_+ \alpha_{i+1/2}^k) \quad | \quad |\alpha_{i-1/2}^k| > |\alpha_{i+1/2}^k|, \quad (3.23)$$

$$\text{если } \alpha_{i+1/2}^k = 0, \text{ то } \gamma_{i+1/2}^k = \tilde{\gamma}_{i+1/2}^k = \hat{\gamma}_{i+1/2}^k = 0, \quad (3.24)$$

в противном случае:

$$\gamma_{i+1/2}^k = \sigma(\lambda_{i+1/2}^k) (\beta_{i+1}^k - \beta_i^k) / \alpha_{i+1/2}^k, \quad (3.25)$$

$$\tilde{\gamma}_{i+1/2}^k = \tilde{\sigma}(\lambda_{i+1/2}^k) (\tilde{\beta}_{i+1}^k - \tilde{\beta}_i^k) / \alpha_{i+1/2}^k, \quad (3.26)$$

$$\hat{\gamma}_{i+1/2}^k = \hat{\sigma}(\lambda_{i+1/2}^k) (\hat{\beta}_{i+1}^k - \hat{\beta}_i^k) / \alpha_{i+1/2}^k. \quad (3.27)$$

В записи схем использованы функции

$$\mathbf{m}(x, y) = \text{MinMod}(x, y) = \begin{cases} s \min(|x|, |y|) & | \text{sgn } x = \text{sgn } y = s \\ 0 & | \text{sgn } x \neq \text{sgn } y \end{cases}, \quad (3.28)$$

$$\overline{\mathbf{m}}(x, y) = \begin{cases} x & | |x| \leq |y| \\ y & | |x| > |y| \end{cases}, \quad (3.29)$$

$\psi(\lambda) = \psi_{\text{Harten}}(\lambda)$  – функция энтропийной коррекции Хартена.

В схеме MUSCL-TVD [51] функция-ограничитель применяется не к характеристическим переменным  $\alpha^k$ , а к основным  $Q^k$ . Аппроксимация здесь достигается за счет шага интерполяции  $Q_{i+1/2}^R$  и  $Q_{i+1/2}^L$ . После этого к реконструированной функции применяется приближенный Римановский метод:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1} + \tilde{\Omega}^{-1} \left| \tilde{\Lambda} \right| \tilde{\Omega} (Q_{i+1/2}^R - Q_{i+1/2}^L) \right). \quad (3.30)$$

Вычисление  $Q_{i+1/2}^R$  и  $Q_{i+1/2}^L$  осуществляется с использованием ограниченных разностей  $\Delta \tilde{Q}_{i-1/2}$  и  $\Delta \tilde{\tilde{Q}}_{i+3/2}$ , подставленных в какую-либо интерполяционную схему, например:

$$Q_{i+1/2}^L = Q_i + \frac{1}{2} \Delta \tilde{Q}_{i-1/2}, \quad (3.31)$$

$$Q_{i+1/2}^R = Q_{i+1} - \frac{1}{2} \Delta \tilde{\tilde{Q}}_{i+3/2}, \quad (3.32)$$

где

$$\Delta \tilde{Q}_{i-1/2}^k = \Delta Q_{i+1/2}^k \cdot B^k \left( \frac{\Delta Q_{i-1/2}^k}{\Delta Q_{i+1/2}^k} \right), \quad (3.34)$$

$$\Delta \tilde{\tilde{Q}}_{i+3/2}^k = \Delta Q_{i+1/2}^k \cdot B^k \left( \frac{\Delta Q_{i+3/2}^k}{\Delta Q_{i+1/2}^k} \right). \quad (3.35)$$

По известной теореме Годунова [43], не существует линейной схемы второго порядка для решения уравнения переноса  $f_t + \lambda f_x = 0$ . Повысить порядок схемы позволяет применение гибридных схем. **Класс гибридных схем** представляет собой схемы высокого порядка точности:

$$f_{i+1/2} = \begin{cases} Scheme_1(f) & | & Cond_1 \\ Scheme_2(f) & | & Cond_2 \\ \dots & & \dots \end{cases} \quad (3.36)$$

Монотонная гибридная схема второго порядка для уравнения переноса [68] может быть обобщена следующим образом [106]:

$$f_{i+1/2} = \alpha f_{i-1}^n + \beta f_i^n + \gamma f_{i+1}^n + \delta f_{i+2}^n, \quad (3.37)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = \frac{C-1}{2}, \quad \beta = \frac{3-C}{2}, \quad \gamma = 0, \quad \delta = 0 \quad | \quad \lambda \geq 0, |f_{i+1} - f_i| \geq |f_i - f_{i-1}| \\ \alpha = 0, \quad \beta = \frac{1+C}{2}, \quad \gamma = \frac{1-C}{2}, \quad \delta = 0 \quad | \quad \lambda \geq 0, |f_{i+1} - f_i| < |f_i - f_{i-1}| \\ \alpha = 0, \quad \beta = \frac{1-C}{2}, \quad \gamma = \frac{1+C}{2}, \quad \delta = 0 \quad | \quad \lambda < 0, |f_{i+2} - f_{i+1}| > |f_{i+1} - f_i| \\ \alpha = 0, \quad \beta = 0, \quad \gamma = \frac{3-C}{2}, \quad \delta = \frac{C-1}{2} \quad | \quad \lambda < 0, |f_{i+2} - f_{i+1}| \leq |f_{i+1} - f_i| \end{array} \right. \quad (3.38)$$

где  $C = \frac{\tau \cdot |\lambda|}{\Delta x}$  – число Куранта.

В зависимости от значения коэффициента  $\lambda$  осуществляется переключение между четырьмя линейными схемами с сохранением монотонности. Данная явная схема для уравнения переноса имеет второй порядок аппроксимации как по пространству, так и по времени для гладких решений, монотонна и консервативна и устойчива при числе Куранта  $C \leq 1$ . Схема включена в пакет программ и эффективно используется при моделировании задач механики сплошных сред, представленных в Главах 5-8.

Некоторые численные методы, такие как метод частиц в ячейках [74], метод крупных частиц [21], статистические методы [23] формулируются для уравнений конкретного вида, в частности для уравнений газодинамики. Применение указанных методов к системе гиперболических уравнений общего вида хотя и возможно, но встречает на своем пути некоторые трудности. В качестве примера можно указать особенность, возникающую при построении метода крупных частиц для уравнений акустики или уравнений упругости: собственные числа, которые соответствуют скоростям крупных частиц, всегда равны нулю. Лагранжев этап метода крупных частиц для этих уравнений становится вырожденным. Конкретный вид уравнений газодинамики позволяет разработать различные варианты метода крупных частиц [107]. На примере этого метода в последующих главах мы покажем, как можно включить новый метод в унифицированную методику построения разностных схем для системы уравнений гидродинамики.

Метод крупных частиц для уравнений Эйлера с компонентами  $\mathbf{Q} = (\rho^s, \rho u, \rho v, \rho w, \rho E)$  в поле силы тяжести:



$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho^s)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho^s \mathbf{V}) &= 0, \\
\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \mathbf{V}) &= -\frac{\partial P}{\partial x}, \\
\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \mathbf{V}) &= -\frac{\partial P}{\partial y}, \\
\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w \mathbf{V}) &= -\frac{\partial P}{\partial z} - \rho g, \\
\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + P)\mathbf{V}) &= -\rho g w,
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Данный метод расщепления соответствует обычному расщеплению по физическим процессам, описанному в Главе 2. Он состоит из с двух итераций, соответствующим эйлерову и лагранжеву этапам. На лагранжевом этапе учитываются только процессы, связанные с переносом импульса и энергии (конвекция), на эйлеровом этапе учитываются все остальные эффекты.

На эйлеровом этапе, который, обычно, идет первым, решается система уравнений:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho^s)}{\partial t} &= 0, \\
\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} &= -\frac{\partial P}{\partial x}, \\
\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} &= -\frac{\partial P}{\partial y}, \\
\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} &= -\frac{\partial P}{\partial z} - \rho g, \\
\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} &= -\operatorname{div}(P\mathbf{V}) - \rho g w,
\end{aligned} \tag{3.40}$$

где в качестве начальных условий берутся  $\mathbf{Q}^n$ . В частности, из первого уравнения следует, что на данном этапе плотность не меняется.

Затем на лагранжевом этапе учитывается конвекция:

$$\frac{\partial(Q_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(Q_i \mathbf{V}) = 0 \tag{3.41}$$

с начальными условиями, полученными на эйлеровом этапе. Это – простое уравнение переноса, которое можно решать различными методами. В

частности, рассмотренным выше монотонным гибридным методом второго порядка.

К схеме для расчета на эйлеровом этапе предъявляются повышенные требования. Она должна обеспечивать устойчивость всего метода. Для обеспечения устойчивости разностной схемы иногда в уравнения вводится псевдовязкость  $q$ , используя вместо давления  $\tilde{P} = P + q$ . Это связано с повышенными требованиями к устойчивости метода на эйлеровом. Существуют различные способы выбора псевдовязкости  $q$ . Например, можно использовать линейную или квадратичную псевдовязкость. При необходимости выбор алгоритма вычисления  $\tilde{P}$  может быть сделан пользователем пакета прикладных программ самостоятельно, исходя из методик, предложенных в пакете программ. В случае, если на обоих этапах метода крупных частиц используются схемы первого порядка, псевдовязкость можно и не применять.

Для расчета на эйлеровом этапе существуют неявные схемы. Применение неявных схем на эйлеровом этапе является более привлекательным по причине лучшей устойчивости и без введения псевдовязкости. Эффективная неявная схема для эйлерова этапа описана в [107]. Здесь из уравнения для внутренней энергии с использованием уравнения состояния выводится уравнение для давления. Схема является схемой бегущего счета.

Опишем трехмерный вариант указанной схемы для уравнений Эйлера при наличии силы тяжести.

Выпишем уравнение для давления, которое следует из уравнения (3.37):

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \text{div}(P\mathbf{V}) + \rho g w = \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(P\mathbf{V}) + \rho u \frac{\partial u}{\partial t} + \rho v \frac{\partial v}{\partial t} + \rho w \frac{\partial w}{\partial t} + \rho g w = \\
 &= \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(P\mathbf{V}) - (\mathbf{V} \cdot \text{grad}(P)) = \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + P \text{div}(\mathbf{V}) = \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t} + P \text{div}(\mathbf{V})
 \end{aligned}
 \tag{3.42}$$

$$\text{при условии } \rho \varepsilon = f(\rho, P), \quad \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial P} = \frac{\partial f(\rho, P)}{\partial P} = \alpha \quad : \quad \frac{\partial P}{\partial t} + \alpha^{-1} P \text{div}(\mathbf{V}) = 0
 \tag{3.43}$$

Аппроксимация уравнений для скорости запишется в следующем виде:

$$u_{i,j,k}^{n+1} = u_{i,j,k}^n - \frac{1}{\rho_{i,j,k}^n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left( \frac{P_{i,j,k}^{n+1} + P_{i+1,j,k}^n}{2} - \frac{P_{i-1,j,k}^{n+1} + P_{i,j,k}^n}{2} \right), \quad (3.44)$$

$$v_{i,j,k}^{n+1} = v_{i,j,k}^n - \frac{1}{\rho_{i,j,k}^n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta y} \cdot \left( \frac{P_{i,j,k}^{n+1} + P_{i,j+1,k}^n}{2} - \frac{P_{i,j-1,k}^{n+1} + P_{i,j,k}^n}{2} \right), \quad (3.45)$$

$$w_{i,j,k}^{n+1} = w_{i,j,k}^n - \frac{1}{\rho_{i,j,k}^n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta z} \cdot \left( \frac{P_{i,j,k}^{n+1} + P_{i,j,k+1}^n}{2} - \frac{P_{i,j,k-1}^{n+1} + P_{i,j,k}^n}{2} \right) - \Delta t \cdot g, \quad (3.46)$$

а уравнения для давления в виде:

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^n - \alpha^{-1} P_{i,j,k}^{n+1/2} \cdot \left[ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( \frac{u_{i,j,k}^{n+1} + u_{i+1,j,k}^n}{2} - \frac{u_{i-1,j,k}^{n+1} + u_{i,j,k}^n}{2} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left( \frac{v_{i,j,k}^{n+1} + v_{i,j+1,k}^n}{2} - \frac{v_{i,j-1,k}^{n+1} + v_{i,j,k}^n}{2} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( \frac{w_{i,j,k}^{n+1} + w_{i,j,k+1}^n}{2} - \frac{w_{i,j,k-1}^{n+1} + w_{i,j,k}^n}{2} \right) \right], \quad (3.47)$$

где

$$P_{i,j,k}^{n+1/2} = \frac{1}{6} (P_{i-1,j,k}^{n+1} + P_{i,j-1,k}^{n+1} + P_{i,j,k-1}^{n+1} + P_{i+1,j,k}^n + P_{i,j+1,k}^n + P_{i,j,k+1}^n). \quad (3.48)$$

Подставляя в формулу (3.47) значения  $u_{i,j,k}^{n+1}$ ,  $v_{i,j,k}^{n+1}$  и  $w_{i,j,k}^{n+1}$ , получаемые из формул (3.44), (3.45) и (3.46), получим:

$$P_{i,j,k}^{n+1} = P_{i,j,k}^n - \alpha^{-1} P_{i,j,k}^{n+1/2} \times \left[ \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left( \frac{u_{i+1,j,k}^n - u_{i-1,j,k}^{n+1}}{2} - \frac{1}{2 \cdot \rho_{i,j,k}^n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( \frac{P_{i,j,k}^{n+1} + P_{i+1,j,k}^n}{2} - \frac{P_{i-1,j,k}^{n+1} + P_{i,j,k}^n}{2} \right) \right) + \frac{\Delta t}{\Delta y} \cdot \left( \frac{v_{i,j+1,k}^n - v_{i,j-1,k}^{n+1}}{2} - \frac{1}{2 \cdot \rho_{i,j,k}^n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta y} \left( \frac{P_{i,j,k}^{n+1} + P_{i,j+1,k}^n}{2} - \frac{P_{i,j-1,k}^{n+1} + P_{i,j,k}^n}{2} \right) \right) + \frac{\Delta t}{\Delta z} \cdot \left( \frac{w_{i,j,k+1}^n - w_{i,j,k-1}^{n+1}}{2} - \frac{1}{2 \cdot \rho_{i,j,k}^n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( \frac{P_{i,j,k}^{n+1} + P_{i,j,k+1}^n}{2} - \frac{P_{i,j,k-1}^{n+1} + P_{i,j,k}^n}{2} \right) - \Delta t \cdot g \right) \right] \quad (3.49)$$

Извлекая из выражения (3.49)  $P_{i,j,k}^{n+1}$ , получим в итоге:

$$\begin{aligned}
P_{i,j,k}^{n+1} = & \left( 1 - \frac{\alpha^{-1} P_{i,j,k}^{n+1/2}}{4 \cdot \rho_{i,j,k}^n} \cdot \left( \left( \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 + \left( \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 + \left( \frac{\Delta t}{\Delta z} \right)^2 \right) \right)^{-1} \cdot \left[ P_{i,j,k}^n - \frac{\alpha^{-1} P_{i,j,k}^{n+1/2}}{2} \times \right. \\
& \times \left[ \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1,j,k}^n - u_{i-1,j,k}^{n+1}) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (v_{i,j+1,k}^n - v_{i,j-1,k}^{n+1}) + \frac{\Delta t}{\Delta z} (w_{i,j,k+1}^n - w_{i,j,k-1}^{n+1}) - \frac{2g(\Delta t)^2}{\Delta z} - \right. \\
& - \frac{1}{2 \cdot \rho_{i,j,k}^n} \cdot \left( \left( \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 (P_{i+1,j,k}^n - P_{i-1,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^n) + \left( \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 (P_{i,j+1,k}^n - P_{i,j-1,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^n) + \right. \\
& \left. \left. \left. + \left( \frac{\Delta t}{\Delta z} \right)^2 (P_{i,j,k+1}^n - P_{i,j,k-1}^{n+1} - P_{i,j,k}^n) \right) \right] \right]. \quad (3.50)
\end{aligned}$$

Формулы (3.41), (3.42), (3.43) и (3.50) составляют численную схему для эйлера этапа. Для вычисления давления  $P_{i,j,k}^{n+1}$  сначала применяется формула (3.50), далее по вычисленному давлению находятся компоненты скорости  $u_{i,j,k}^{n+1}$ ,  $v_{i,j,k}^{n+1}$  и  $w_{i,j,k}^{n+1}$  по формулам (3.41), (3.42), (3.43). Для проведения вычислений в точке  $(i, j, k)$  требуется знать значения с  $(n+1)$ -го временного слоя: в точках  $(i-1, j, k)$ ,  $(i, j-1, k)$  и  $(i, j, k-1)$ . Используя в расчетах, например, лексикографический порядок обхода области в любом порядке следования переменных  $x, y, z$ , мы получаем схему бегущего счета.

Данная схема включена в пакет программ и используется для численного решения задач механики сплошных сред.

### 3.2 Экспериментальные исследования разностных моделей газовой динамики с ударными волнами

С середины прошлого века дискретные модели газовой динамики, в том числе с разрывными решениями (ударными волнами), стали активно развиваться в продолжение знаменитой работы Неймана и Рихтмайера [37,40]. В предложенной там конструкции существенную роль играли диссипативные члены, моделирующие вязкость и теплопроводность. В дальнейшем началось бурное развитие вычислительных методик решения аналогичных задач, основанных, как правило, на создании разностных схем, основанных на весьма разнообразных идеях. Надо отметить два русских издания и одно английское

книги [12], содержащей обзор значительного числа соответствующих работ. Новую точку зрения на эти работы и их частичную систематизацию предложил А.В. Сафронов в серии работ, из которых отметим [108]. В этой работе удалось систематизировать схемы, предлагавшиеся различными авторами, указав для каждой из них использованную вариацию дополнительных слагаемых, вводимых в разностные уравнения при аппроксимациях.

Академик С.К. Годунов плодотворно участвовал в отечественном развитии исследований Неймана и Рихтмайера, в которых вместо введения диссипативных членов предложил включить в вычислительные процедуры задачи о распаде произвольного разрыва [43,10]. Искусственная вязкость проявляется в градиентных зонах течения, «размазывая» разрывы. При численном решении задач газодинамики методом Годунова эту роль играет схемная вязкость [43]. Метод Годунова первого порядка, основанный на точном итерационном решении задачи Римана о распаде газодинамического разрыва, обладает минимальной схемной вязкостью, обеспечивающей сквозной расчет сложных течений с разрывами. Широкое распространение получили методы на основе приближенного решения задачи Римана. К данному классу относятся известные схемы LxF(Lax-Friedrichs) [35,38], Русанов [109], HLL (Harten, Lax, Leer) [110], Roe [54], Холодова А.С. [33], EO (Engquist – Osher,) [48,62], HLLC (Toro, Spruce, Speare) [111].

Интенсивное развитие методов Годунова связано с повышением порядка аппроксимации вычислений на основе применения процедур интерполяции параметров к граням ячейки сетки с ограничителями, обеспечивающими монотонность схемы. Первый такой ограничитель предложен Колганом [23], изложение теории и обзор вариантов можно найти в работах [112-117]. Отметим, что повышение порядка аппроксимации уменьшает различие между методами на основе точного и приближенных решений задачи Римана. После интерполяции к граням ячейки (реконструкции), параметры на границе ячейки в схемах повышенного порядка вычисляются аналогично схеме первого порядка из задачи распада разрыва.

Данная часть диссертации является логическим развитием работы [43]. Отметим, что в первоначальных расчетах ударные волны «размазывали» на 3-6 соседних интервала между точками сетки, то теперь оказывается возможным использовать такое размазывание на 10, 20 и даже несколько тысяч пространственных сеточных интервалов. При этом разрывы в решениях превращаются в гладкие графики, которые удастся рассчитывать с помощью

линеаризованных уравнений без каких-либо дополнительных итераций. Заготовки, полученные с помощью линеаризованных уравнений, в дальнейшем расчете используются в нелинейных слагаемых, входящих в законы сохранения. Предложенная линеаризованная схема – простейшая схема первого порядка точности. Проводя исследования на очень мелких сетках, мы добиваемся размазывания зон с большими градиентами на большое количество точек, что обеспечивает повышенную работоспособность схемы и контролируемое «размазывание» разрывных решений. Расчеты, проводившиеся на различных сетках одной и той же задачи, демонстрируют сходимость решений к кусочно-гладким функциям с разрывами, моделирующими ударные волны. Именно это обстоятельство позволяет надеяться на то, что тщательное исследование описываемых нами сходимостей приведет к созданию математически строгой модели «обобщенных решений» уравнений газовой динамики.

Используемая здесь вычислительная схема достаточно подробно описана в последующих разделах. Результаты представлены на графиках, анализ которых свидетельствует о сходимости рассчитываемых решений при измельчении расчетной сетки к «обобщенным решениям» соответствующих дифференциальных уравнений.

В настоящей главе исследованы задачи о сильных распадах начальных разрывов. Показано, что решение обсуждаемых задач на нашей схеме на мелких сетках не приводит к каким-либо сложностям и неожиданным эффектам [118,119].

### **3.2.1 Метод Годунова с линейными распадами разрыва для одномерного случая**

Опишем формулировку метода С.К. Годунова с линейными распадами разрыва, которая обеспечивает гарантированное неубывание энтропии. Вносимые в схему линейные упрощения основаны на использовании симметрической гиперболичности линеаризованного варианта решаемых уравнений. Эта гиперболичность существенно упрощает решение линеаризованных задач Римана при нахождении потоков на границах счетных ячеек. Кроме того, расчет каждого шага завершается вычислением энтропии из закона сохранения энергии. Данная конструкция схемы обеспечивает при этом строгое обеспечение неубывания энтропии [24].

Рассмотрим конструкцию разностной схемы для уравнений газовой динамики:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial\left(\rho \frac{u^2}{2} + \rho E\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left[u\left(\rho \frac{u^2}{2} + \rho E + p\right)\right]}{\partial x} &= 0\end{aligned}\tag{3.51}$$

на примере газа с классическим уравнением состояния  $E = \frac{p}{(\gamma-1)\rho}$ . (См. Главу 5). Давление  $p$  в таком газе при известной плотности  $\rho$  определяется формулой  $p = \sigma(S)\rho^\gamma$ , где  $S$  - энтропийная переменная. Скорость звука в таком газе -  $c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}$ . В этом простейшем случае изучаемые уравнения могут быть переписаны через переменные  $u, p, \rho$  следующим образом

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u^2)}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial\left(\rho \frac{u^2}{2} + \frac{p}{\gamma-1}\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left[u\left(\rho \frac{u^2}{2} + \frac{\gamma p}{\gamma-1}\right)\right]}{\partial x} &= 0\end{aligned}\tag{3.52}$$

что позволит сделать выкладки более простыми.

При конструировании описываемой разностной схемы, мы на каждом временном слое  $t = t^n = const$  обозначим границы сеточных ячеек координатами

$$\dots, x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, \dots$$

Шаг  $\tau^{n+1/2} = t^n - t^{n-1}$  между последовательными временными шагами во время расчета решения вычисляется по определенной схеме, описанной ниже.

В начальный момент времени  $t = t^n$  в каждой сеточной ячейке  $x_{j-1} < x < x_j$  заданы значения  $\rho_{j-1/2}^n, u_{j-1/2}^n, p_{j-1/2}^n$ . Предполагается, что они в каждой сеточной ячейке постоянны.

После этого в каждой ячейке вычисляются вспомогательные величины  $c_{j-1/2} = \sqrt{\gamma p_{j-1/2} / \rho_{j-1/2}}$  и  $\sigma_{j-1/2} = p_{j-1/2} / \rho_{j-1/2}^\gamma$  (скорость звука и энтропийная переменная).

Таким образом, перед началом расчёта предполагаются известными следующие величины:

$$\begin{aligned} \dots, x_{j-2}^n, u_{j-\frac{3}{2}}^n, \rho_{j-\frac{3}{2}}^n, p_{j-\frac{3}{2}}^n, x_{j-1}^n, u_{j-\frac{1}{2}}^n, \rho_{j-\frac{1}{2}}^n, p_{j-\frac{1}{2}}^n, x_j^n, u_{j+\frac{1}{2}}^n, \rho_{j+\frac{1}{2}}^n, p_{j+\frac{1}{2}}^n, x_{j+1}^n, \dots \\ \dots, c_{j-\frac{3}{2}}^n, \sigma_{j-\frac{3}{2}}^n, c_{j-\frac{1}{2}}^n, \sigma_{j-\frac{1}{2}}^n, c_{j+\frac{1}{2}}^n, \sigma_{j+\frac{1}{2}}^n, \dots \end{aligned} \quad (3.53)$$

Расчет начинается с определения на границах  $x_j$  ячеек величин  $U_j^{n+1/2}$ ,  $P_j^{n+1/2}$ ,  $R_j^{n+1/2}$ , которые при  $t$  из интервала  $t_n < t < t_{n+1}$  будут предполагаться постоянными. Мы полагаем:

$$P_j^{n+1/2} = \frac{\frac{p_{j-1/2}^n}{\rho_{j-1/2}^n c_{j-1/2}^n} + \frac{p_{j+1/2}^n}{\rho_{j+1/2}^n c_{j+1/2}^n} + u_{j-1/2}^n - u_{j+1/2}^n}{\frac{1}{\rho_{j-1/2}^n c_{j-1/2}^n} + \frac{1}{\rho_{j+1/2}^n c_{j+1/2}^n}}, \quad (3.54)$$

$$U_j^{n+1/2} = \frac{\rho_{j-1/2}^n c_{j-1/2}^n u_{j-1/2}^n + \rho_{j+1/2}^n c_{j+1/2}^n u_{j+1/2}^n + p_{j-1/2}^n - p_{j+1/2}^n}{\rho_{j-1/2}^n c_{j-1/2}^n + \rho_{j+1/2}^n c_{j+1/2}^n}$$

Эти формулы для  $U_j^{n+1/2}$  и  $P_j^{n+1/2}$  являются следствием постоянства на рассматриваемом шаге по времени римановых инвариантов в ячейках, примыкающих к границе  $x_j$ . Это постоянство аппроксимируется равенствами

$$u_{j\pm\frac{1}{2}}^n \pm \frac{p_{j\pm\frac{1}{2}}^n}{\rho_{j\pm\frac{1}{2}}^n c_{j\pm\frac{1}{2}}^n} = U_j^{n+1/2} \pm \frac{P_j^{n+1/2}}{\rho_{j\pm\frac{1}{2}}^n c_{j\pm\frac{1}{2}}^n} \quad (3.55)$$

которые приведённым формулам эквивалентны.

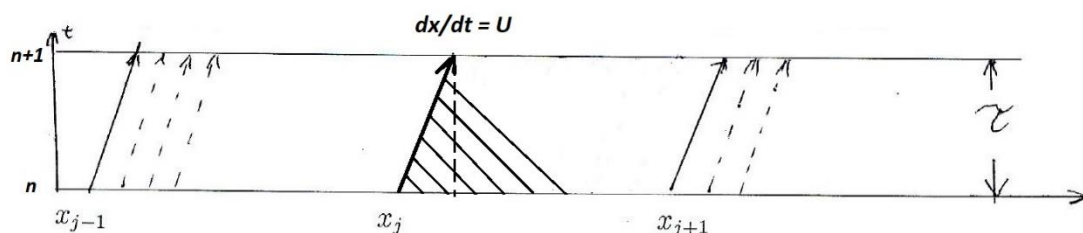
Значения плотности  $R_j^{n+1/2}$  в граничной точке  $x_j$  определим формулами

$$R_j^{n+1/2} = \begin{cases} \rho_{j-1/2}^n \left( 1 - \frac{U_j^{n+1/2} - u_{j-1/2}^n}{c_{j-1/2}^n} \right), & \text{если } U_j^{n+1/2} \geq 0 \\ \rho_{j+1/2}^n \left( 1 - \frac{u_{j+1/2}^n - U_j^{n+1/2}}{c_{j+1/2}^n} \right), & \text{если } U_j^{n+1/2} < 0 \end{cases} \quad (3.56)$$



Эти формулы показывают, как при граничной точке  $x_j$  ячейки  $x_j^n \rightarrow x_j^{n+1} = x_j^n + \tau^{n+1/2} U_j^{n+1/2}$  изменяется плотность  $R_j^{n+1/2}$  в точке  $x_j$  из-за того, что рассматриваемая граница «вторгается» в соседнюю (справа или слева от неё) сеточную ячейку. С точностью до замены обозначений ( $\rho_{j\pm 1/2}, c_{j\pm 1/2}$  на  $\rho_0, c_0; R_j$  на  $R_{III}$  и  $R_{IV}$ ) приведенные здесь формулы взяты из §16 стр. 131 книги [44]. В цитируемой книге коэффициенты  $\rho_j, c_j$  способ распределения по ячейкам сетки делается отличным от способа, применяемого в описанной в этом разделе, схемы. Область применимости предлагаемого нами правила расчета значений  $R_j^{n+1/2}$  требует дальнейшего изучения.

При выводе формул для  $R_j^{n+1/2}$  оказывается удобным использовать несколько иную реализацию разностной модели сеточной ячейки, чем та, которая описывалась в книге [44]. Для этого промоделируем процедуры расчета параметров в ячейках с помощью рисунка (Фиг.3.1).



Фиг.3.1 Модель поведения характеристик в ячейках

Здесь сплошными наклонными линиями изображены траектории граничных для ячеек точек  $x_j$ , а тонкими наклонными – характеристики  $\frac{dx}{dt} = u - c$ . Вертикальная пунктирная прямая, проходящая через точку  $x_j^{n+1}$ , состоит из точек среды, которые не сдвигаются по горизонтали, несмотря на перемещение точек сетки. Эта прямая является характеристикой решаемых уравнений, на которой разность  $p - \rho c^2$  остается постоянной. Поэтому в рассматриваемой ячейке  $x_{j+1/2}$  и на ее границе  $x_j$  можно считать

$$P_j^{n+1/2} - R_j^{n+1/2} (c_{j+1/2}^n)^2 = p_{j+1/2}^n - \rho_{j+1/2}^n (c_{j+1/2}^n)^2 \quad (3.57)$$

С другой стороны, риманов инвариант вдоль характеристики

$\frac{dx}{dt} = u_{j+1/2} - c_{j+1/2}$ , проходящей через точку  $x_j^{n+1}$ , будет иметь вид:

$$(U_j^{n+1/2} - u_{j+1/2}^n) c_{j+1/2}^n - \frac{1}{\rho_{j+1/2}^n} (P_j^{n+1/2} - p_{j+1/2}^n) = 0 \quad (3.58)$$

Сравнивая предыдущие два уравнения можно заключить, что

$$R_j^{n+1/2} = \rho_{j+1/2}^n \left( 1 - \frac{u_{j+1/2}^n - U_j^{n+1/2}}{c_{j+1/2}^n} \right) \quad (3.59)$$

для случая  $x - Ut > 0$  ( $U_j^{n+1/2} < 0$ ) и ячейки с номером  $j + 1/2$ .

Выполняя аналогичные рассуждения для ячейки  $j - 1/2$  и случая  $x - Ut < 0$  ( $U_j^{n+1/2} > 0$ ), получаем выражение для плотности

$$R_j^{n+1/2} = \rho_{j-1/2}^n \left( 1 - \frac{U_j^{n+1/2} - u_{j-1/2}^n}{c_{j-1/2}^n} \right) \quad (3.60)$$

Таким образом, выбор одной из этих возможных характеристик мы связали со знаком наклона  $U_j$  граничной траектории, так как давления  $P_j$  как справа, так и слева в точках ячеек  $j \pm 1/2$ , примыкающих к этой траектории, должны быть одинаковыми.

После этого в граничных точках  $x_j$  ячеек находятся величины

$$[R_j U_j]^{n+\frac{1}{2}}, [P_j + R_j U_j^2]^{n+\frac{1}{2}}, [ZU]_j^{n+\frac{1}{2}} = \left[ U_j \left( \frac{\gamma P_j}{\gamma - 1} + \frac{R_j (U_j)^2}{2} \right) \right]^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.61)$$

Следующие равенства (законы сохранения) определяют интересующие нас величины при  $t = t^{n+1}$

$$\begin{aligned} x_j^{n+1} &= x_j^n + \tau^{n+\frac{1}{2}} U_j^{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{\rho_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} - \rho_{j-\frac{1}{2}}^n}{\tau^{n+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{x_j^n - x_{j-1}^n} \left( R_j^{n+\frac{1}{2}} U_j^{n+\frac{1}{2}} - R_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} U_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} \right) &= 0 \\ \frac{\rho u_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} - \rho u_{j-\frac{1}{2}}^n}{\tau^{n+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{x_j^n - x_{j-1}^n} \left( (P + RU^2)_j^{n+\frac{1}{2}} - (P + RU^2)_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} \right) &= 0 \\ \frac{H_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} - H_{j-\frac{1}{2}}^n}{\tau^{n+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{x_j^n - x_{j-1}^n} \left( [ZU]_j^{n+\frac{1}{2}} - [ZU]_{j-1}^{n+\frac{1}{2}} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (3.62)$$

Здесь для удобства вводятся обозначения термодинамическая характеристика газа *энтальпия*:  $H_{j-\frac{1}{2}}^n = \left( \rho \frac{u^2}{2} + \frac{p}{\gamma-1} \right)_{j-\frac{1}{2}}^n$ . После этого по существу завершён расчёт одного шага по времени, который заканчивается вычислением величин:

$$x_j^{n+1}, u_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}, \rho_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}, p_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}, c_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}, \sigma_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}, \quad (3.63)$$

Формулы для расчёта этих величин приведены ниже:

$$u_{j+1/2}^{n+1} = \frac{\rho u_{j+1/2}^{n+1}}{\rho_{j+1/2}^{n+1}}$$

$$p_{j+1/2}^{n+1} = (\gamma - 1) \left( \left[ \rho_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{\left( u_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} \right)^2}{2} + \frac{p_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\gamma - 1} \right] - \frac{\rho_{j+1/2}^{n+1} \left( u_{j+1/2}^{n+1} \right)^2}{2} \right)$$

$$c_{j+1/2}^{n+1} = \sqrt{\frac{\gamma p_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\rho_{j+1/2}^{n+1}}}, \quad \sigma_{j+1/2}^{n+1} = \frac{p_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\left( \rho_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} \right)^\gamma} \quad (3.64)$$

В результате можно приступить к расчёту следующего шага  $\tau^{n+\frac{1}{2}}$  по времени  $\tau^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$ . Правила определения шага по времени  $\tau^{n+\frac{1}{2}}$  опишем в следующем пункте этого параграфа.

### 3.2.1.1 Выбор допустимого шага по времени (условие Куранта)

При выборе допустимого в исследуемой разностной схеме величины шага по времени  $\tau^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$  мы основываемся на хорошо известном критерии Куранта, состоящем в ограничении, которое заключается в том, чтобы ни одна из характеристик  $\frac{dx}{dt} = u \pm c$ ,  $\frac{dx}{dt} = u$  изучаемой системы за время  $\tau^{n+1}$  не могла передвинуться внутри каждой ячейки, ограниченной координатами  $x_j^n$  и  $x_{j+1}^n$ , на расстояние, большее чем  $|x_{j+1}^n - x_j^n|$ . Иными словами, мы должны задавшись неким допустимым числом  $0 < CFL < 1$  определить  $\tau^{n+1/2}$  формулой  $\tau^{n+1/2} < CFL \times$

$\frac{|x_{j+1}^n - x_j^n|}{\max\{|u_{j+1/2}^n - c_{j+1/2}^n|, |c_{j+1/2}^n|, |u_{j+1/2}^n - c_{j+1/2}^n|\}}$ . (Символ *CFL* связан с работой Куранта, Фридрихса и Леви 1928г., в которой этот критерий был предложен). Во всех описываемых нами расчетах используется этот критерий. Можно предполагать, что траектории граничных точек – это траектории частиц газа. При этом всегда между двумя соседними траекториями таких граничных точек содержится одна и та же масса газа. Выполнение условия Куранта для шага по времени обеспечивает движение сеточных траекторий  $x_j(t)$  по газу с дозвуковыми скоростями. При этом сам газ может перемещаться и со сверхзвуковой скоростью в тех или иных областях. Это явление проявляется при рассмотрении приводимых в этой работе расчетах.

Приведенная в этой части работы методика основана на использовании линеаризованных уравнений газовой динамики, широко употребляемых при конструировании разностных схем, описанных в книге [44]. Однако, в данной работе эта линеаризация применяется не непосредственно для функций, входящих в запись законов сохранения, а посредством точной линеаризации на ребрах счетных ячеек вспомогательных величин  $U_j^{n+\frac{1}{2}}, P_j^{n+\frac{1}{2}}, R_j^{n+\frac{1}{2}}$ , которые не входят самостоятельно в предполагаемую разностную модель. Вместо них потоки массы, импульса и энергии через ребра ячеек представляются нелинейно зависящими от

$$U_j^{n+\frac{1}{2}}, P_j^{n+\frac{1}{2}}, R_j^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.65)$$

величинами

$$R_j^{n+\frac{1}{2}} U_j^{n+\frac{1}{2}}, P_j^{n+\frac{1}{2}} + R_j^{n+\frac{1}{2}} \left( U_j^{n+\frac{1}{2}} \right)^2, U_j^{n+\frac{1}{2}} \left( H_j^{n+\frac{1}{2}} + P_j^{n+\frac{1}{2}} \right). \quad (3.66)$$

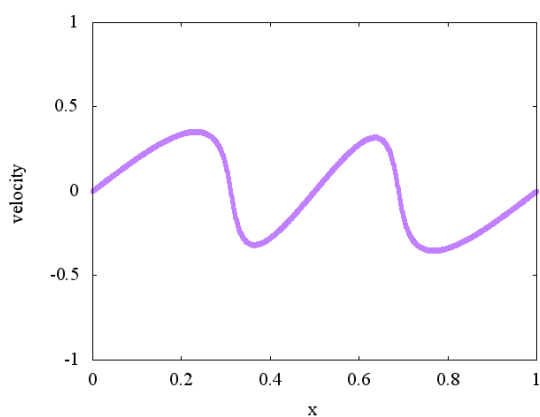
## 3.2.2 Численный эксперимент

### 3.2.2.1 Анализ непрерывного решения

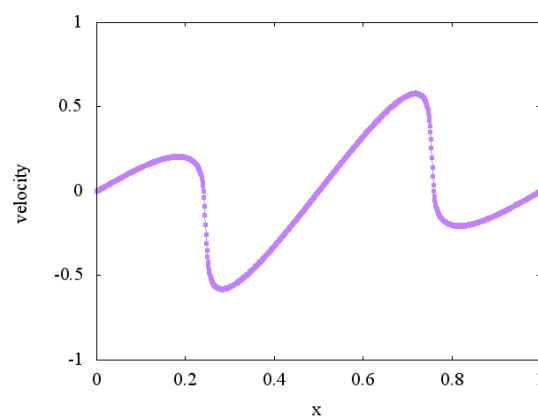
Проверим работу схемы при моделировании решения из непрерывных начальных данных. Положим:

$$u(x, 0) = \sin(2\pi x), p(x, 0) = 1, \rho(x, 0) = 1. \quad (3.67)$$

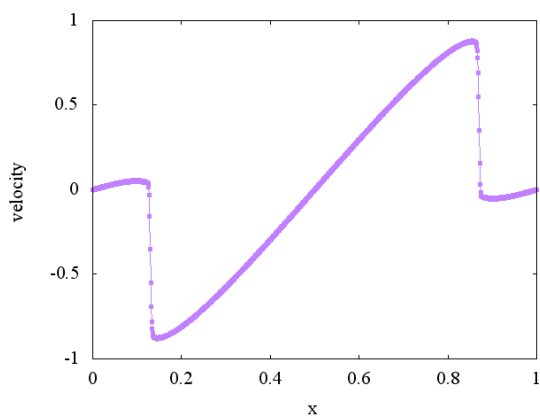
На **Фиг.3.2** и **Фиг.3.3** изображено решение в начальные моменты времени. В силу соответствующих начальных данных решение гладкое. В последующие моменты времени, которые представлены на **Фиг.3.4** и **Фиг.3.5**, структура решения изменяется: происходит «опрокидывание» ударных волн, что существенно влияет на гладкость решения. Можно проследить зоны разрывов – сформировавшихся ударных волн.



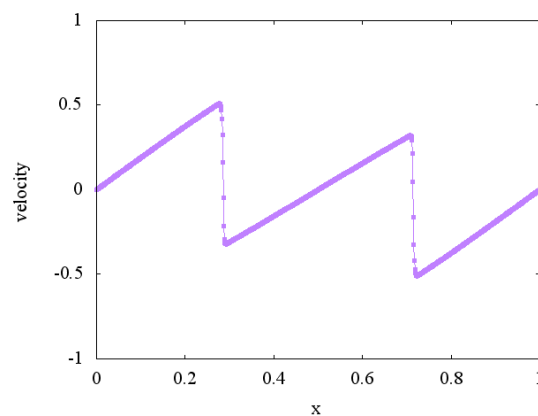
**Фиг.3.2** Синусоида.  $CFL = 0.8, t=0.05$



**Фиг.3.3** Синусоида.  $CFL = 0.8, t=0.25$



**Фиг.3.4** Синусоида.  $CFL = 0.8, t=0.35$



**Фиг.3.5** Синусоида.  $CFL = 0.8, t=0.65$

### 3.2.3 Задача с изолированной ударной волной

Рассмотрим задачу о распространении ударной волны. Расчетная область представлена в квадрате  $a \leq x \leq b, 0 \leq t \leq T$ ,  $a = 0$ ,  $b = 1$ ,  $T = 0.1$ . В точке  $x = x_0$  задается разрыв,  $x_0 = 0.1$ . Разрывные (кусочно-постоянные) начальные условия при  $t = 0$  соответствуют *соотношениям на точной ударной волне* (см. **Таб.3.1**)

$t = 0$	$x < x_0$	$x > x_0$
давление	1.4017	1.00
плотность	1.2714	1.00
скорость	0.2928	0.00
<i>Таб.3.1 Начальные условия для задачи с изолированной ударной волной</i>		

#### 3.2.3.1 Формирование стационарной структуры ударной волны.

##### Влияние числа Куранта на структуру

Расчет ведется на равномерной сетке из  $N$  ячеек, где  $N = 100$ . При необходимости сетка можеткратно дробиться для исследования сеточной сходимости. Используется схема Годунова с линеаризованным решателем, о которой шла речь в предыдущем разделе. Потoki между ячейками вычисляются с помощью приближенного линейного решателя задачи о распаде разрыва.

Рассмотрим движение ударной волны с течением времени. Зафиксируем число Куранта:  $CFL = 0.8$ . Ширина ударной волны увеличивается со временем примерно степенным образом:

$$N_{sw} = t^\alpha.$$

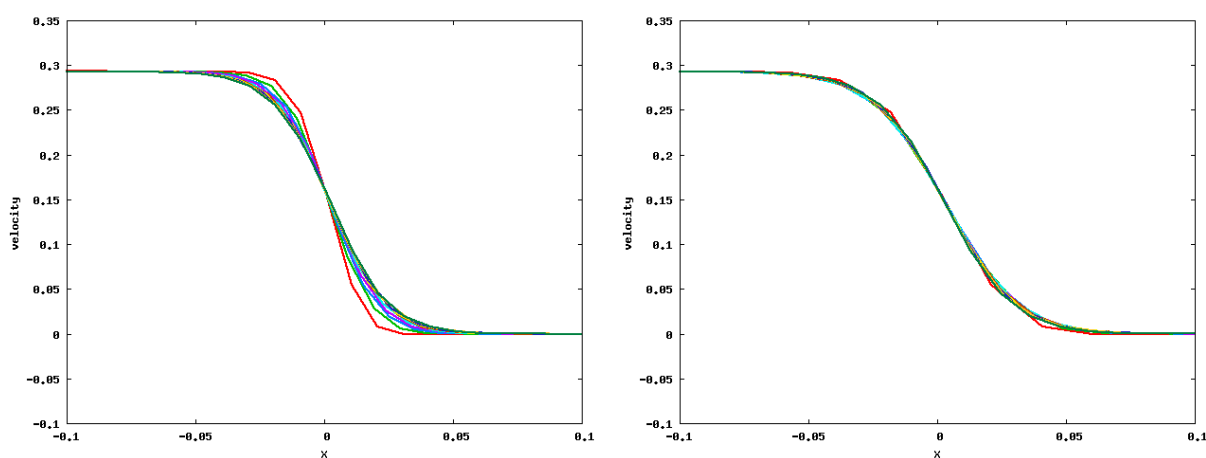
Чтобы определить точное значение  $\alpha$  изобразим численные значения фронта волны в последовательные моменты времени в некотором фиксированном квадрате:

$$\tilde{x} = \frac{x - Dt - x_0}{t^\alpha}, \quad (3.68)$$

где  $D$  - скорость ударной волны, а  $x_0$  - начальное положение волны (точка разрыва). Начальные данные задачи - разрывные, однако конечно-разностное

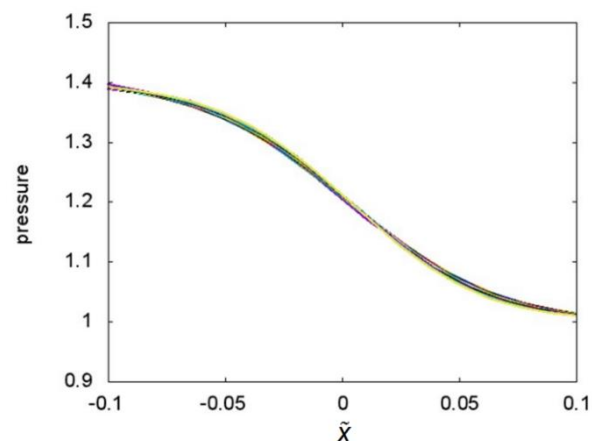
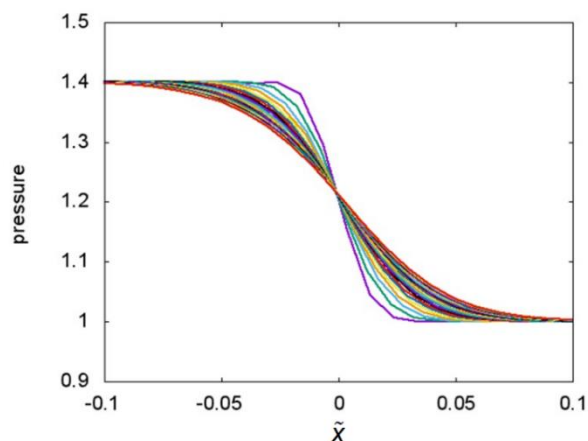
решение размазывается. Более того, виден процесс формирования структуры волны, т.е. форма волны меняется в ходе процесса размазывания.

На **Фиг.3.6** и **Фиг.3.7** показана динамика ударной волны в последовательные моменты времени. Для  $\alpha = 0$  кривые в разные моменты времени пересекаются в точке  $x = 0$  под разным углом, что является следствием разной структуры решения. Однако при  $\alpha = 0.22$  кривые совпадают в одну линию и, в итоге, имеется зависимость числа счетных точек на эффективной толщине ударной волны от времени как  $N_{sw} = t^{0.22}$ .



**Фиг.3.6** Ударная волна.  $CFL = 0.8$ ,  $\alpha = 0.0$       **Фиг.3.7** Ударная волна.  $CFL = 0.8$   $\alpha = 0.22$

При уменьшении числа Куранта до  $CFL = 0.4$  (**Фиг.3.8** и **Фиг.3.9**) зависимость меняется на  $N_{sw} = t^{0.34}$ . Таким образом, из вычислительных экспериментов можно сделать первое заключение, что *ширина ударной волны зависит от числа Куранта*. Если же зафиксировать шаг сетки и момент времени, то ударная волна размазывается на большее число точек для меньшего числа Куранта. Это означает, что для меньшего Куранта требуется вдвое больше времени для *установления стандартной сеточной толщины ударной волны*.



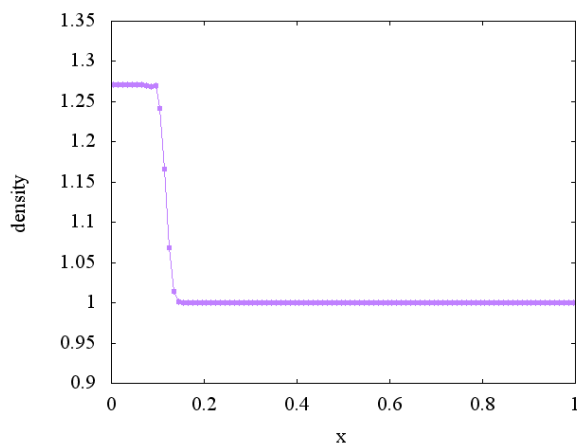
**Фиг.3.8** Ударная волна.  $CFL = 0.4$ ,  $\alpha = 0.0$       **Фиг.3.9** Ударная волна.  $CFL = 0.4$ ,  $\alpha = 0.35$

### 3.2.3.2 Характер сходимости сеточных функций

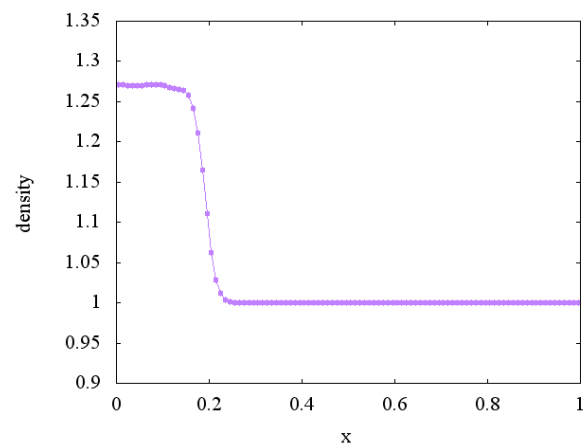
Следующий вопрос, который требует численной проверки, заключается в анализе формирования стационарной структуры ударной волны при ее движении. Сначала зафиксируем шаг по времени на  $h = \frac{1}{N}$ ;  $N = 100$ , и в начальные моменты движения волны рассмотрим изменение ее структуры в плотности и энтропии. Эти две величины наиболее чувствительны к разностным погрешностям.

На **Фиг.3.10-Фиг.3.13** показано формирование структуры волны из разрывных начальных условий в плотности. Видно, что в начале волна представляет собой «ступеньку» с 4 точками на волне, которые за очень маленькое время превращаются в 10-12 точек.

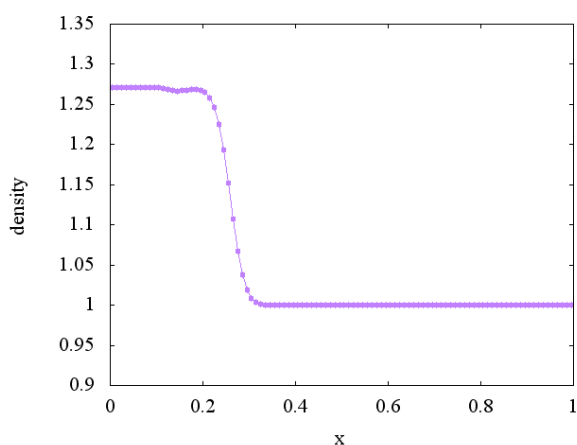




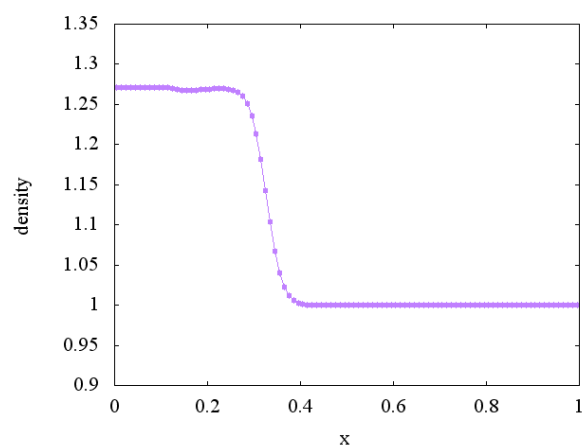
**Фиг.3.10** Ударная волна. Плотность.  
 $t = 0.0125$



**Фиг.3.11** Ударная волна. Плотность.  
 $t = 0.0625$

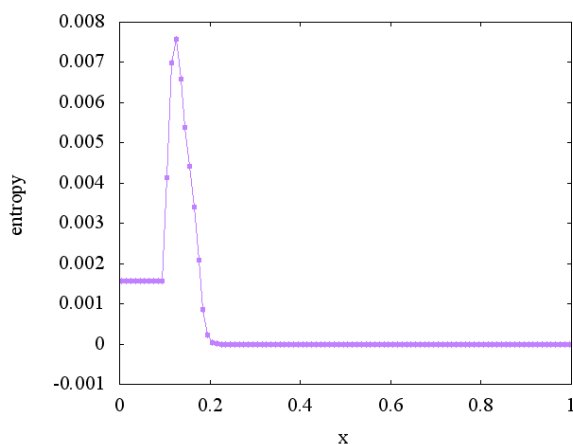


**Фиг.3.12** Ударная волна. Плотность.  
 $t = 0.1125$

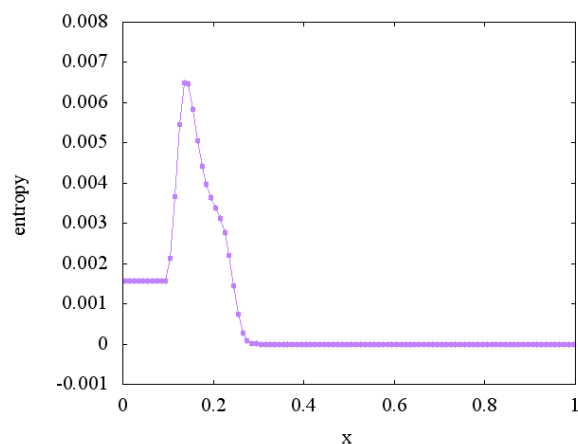


**Фиг.3.13** Ударная волна. Плотность.  
 $t = 0.1625$

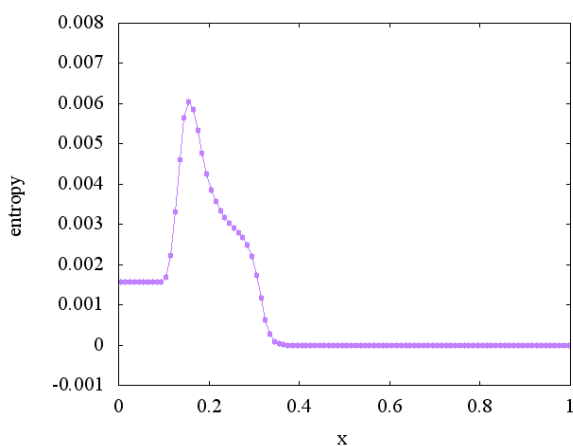
На **Фиг.3.14-Фиг.3.17** показано формирование структуры волны из разрывных начальных условий в энтропии. Здесь наблюдается более интересная ситуация на контактном разрыве в виде зоны, похожей на некоторый «пик».



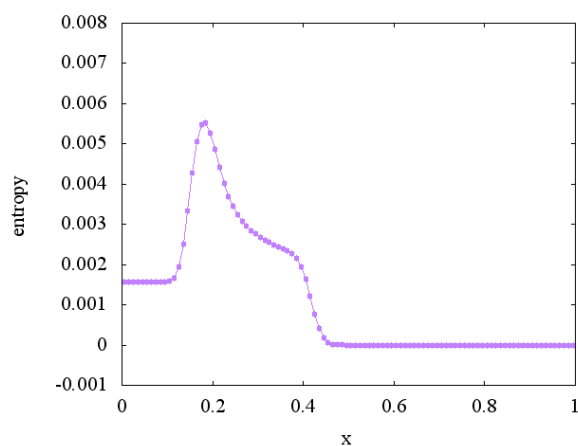
**Фиг.3.14** Ударная волна. Энтропия.  
 $t = 0.0125$



**Фиг.3.15** Ударная волна. Энтропия.  
 $t = 0.0625$

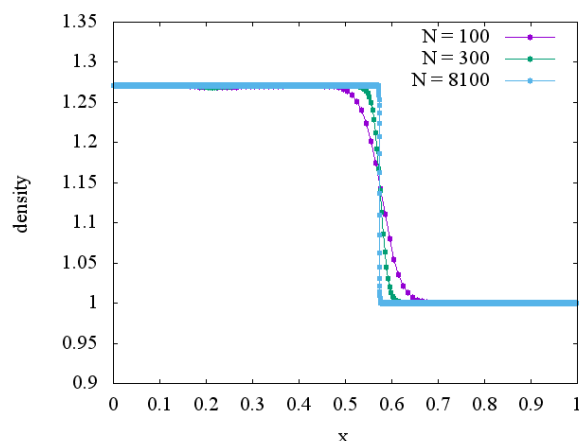
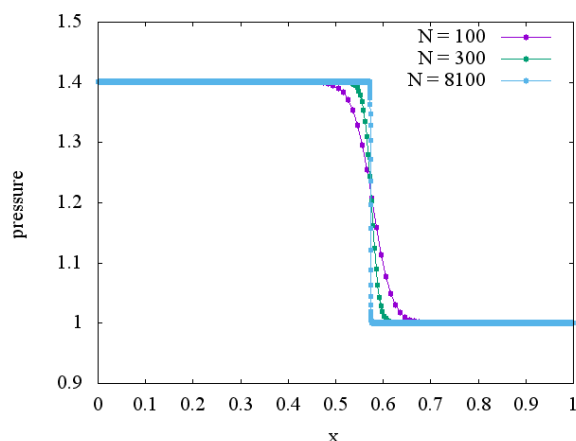


**Фиг.3.16** Ударная волна. Энтропия.  
 $t = 0.1125$



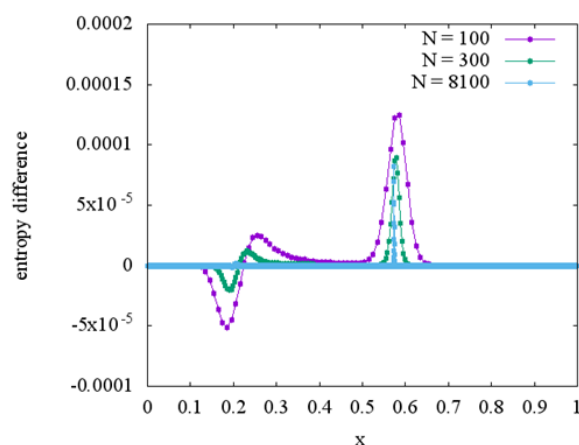
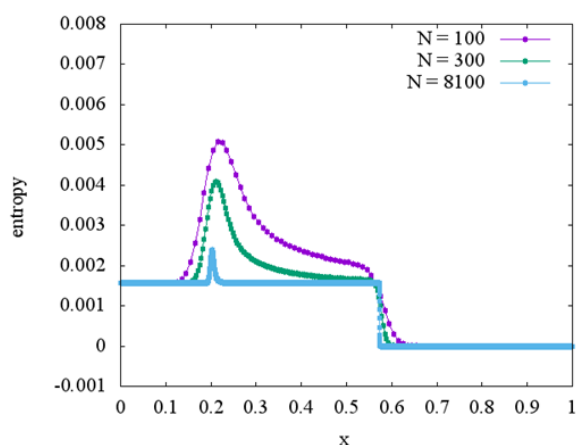
**Фиг.3.17.** Ударная волна. Энтропия.  
 $t = 0.1625$

На **Фиг.3.18-Фиг.3.21** показано, как изменяются данные области при измельчении расчетной сетки. Видно, что разностные погрешности пропадают, и в дальнейшем, не влияют на слабую сходимость решений при  $h \rightarrow 0$ .



**Фиг.3.18** Ударная волна. Давление.  $t = 0.34$

**Фиг.3.19** Ударная волна. Плотность.  $t = 0.34$



**Фиг.3.20** Ударная волна. Энтропия.  $t = 0.34$

**Фиг.3.21** Ударная волна. Разница энтропии для двух последующих  $t = 0.34$  и  $t + \tau$

Также численно проверено выполнение закона неубывания энтропии на ударной волне. На **Фиг.3.20** изображено распределение энтропии, полученное с помощью уравнения состояния идеального газа. На **Фиг.3.21** для фиксированного момента времени взята *разница распределения энтропии на нижнем и верхнем слое расчетной ячейки*. В результате в зоне ударной волны наблюдается подъем энтропии, ширина которого при измельчении сетки уменьшается. В зоне за ударной волной (зона контактного разрыва), на мелких сетках наблюдается небольшие провалы, однако при  $h \rightarrow 0$  они практически исчезают.

### 3.2.4 Задача о распаде произвольного разрыва

Заданные вопросы также были изучены на примере волн разрежения и ударных волн в задаче Римана о распаде произвольного разрыва. Формирование волн после распада происходит с помощью более сложных механизмов, чем в задаче об изолированной ударной волне, что также может влиять на точность решений. Расчетная область имеет такой же вид:  $a \leq x \leq b, 0 \leq t \leq T$ ,  $a = 0$ ,  $b = 1$ ,  $T = 0.1$ . Разрыв задается в точке  $x_0 = 0.5$ . Разрывные (кусочно-постоянные) начальные условия будут определять соответствующую конфигурацию распада. Сначала исследуем конфигурацию с волной разрежения и ударной волной.

#### 3.2.4.1 Конфигурация с волной разрежения и ударной волной

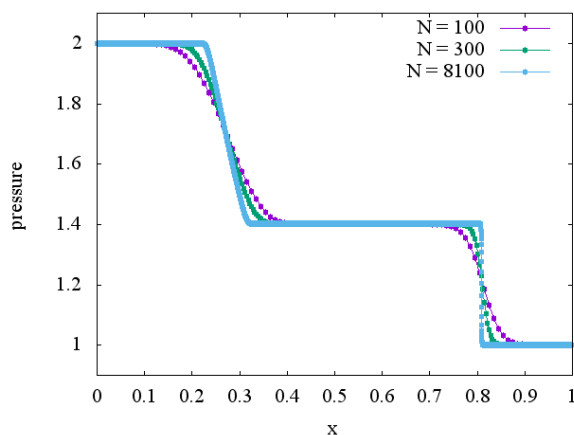
Разрывные (кусочно-постоянные) начальные условия в этом случае имеют вид (см. Таб.3.2):

	$x < x_0$	$x > x_0$	контактный разрыв (решение)
давление	2.00	1.00	1.4017
плотность	2.00	1.00	1.5512/1.2712
скорость	0.00	0.00	0.2928

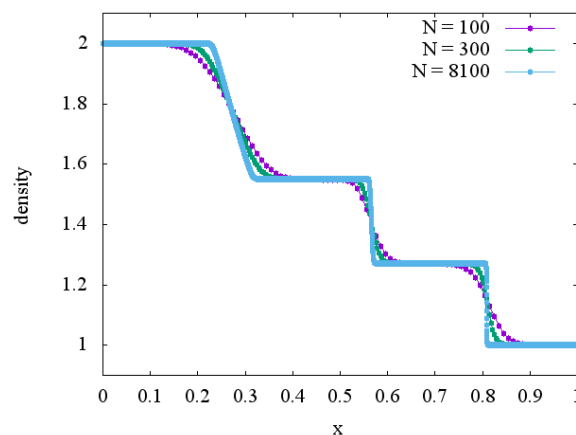
*Таб.3.2 Начальные условия для задачи с волной разрежения и ударной волной*

На нижеприведенных графиках приведены сеточные решения для шагов по пространству  $h = 1.0/N$ , где в качестве  $N$  брались величины 100, 300 и 8100. Легко заметить сходимость сеточных решений к некоторому виду, который мы будем называть «обобщённым решением» (Фиг.3.22 и Фиг.3.23).

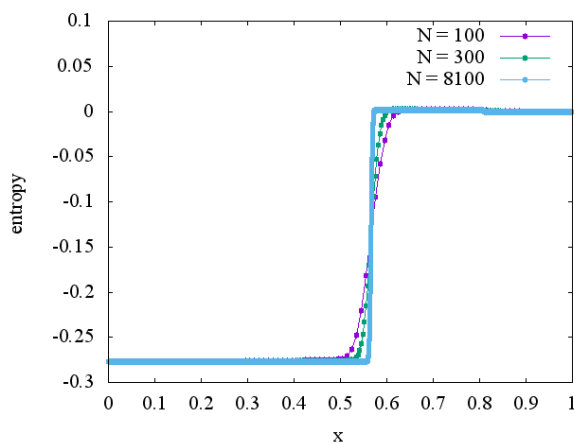
Хотя разностные эффекты падения энтропии в зоне контактного разрыва уменьшаются с измельчением шага сетки и становятся пренебрежимо малы по сравнению с масштабом задачи, на самой ударной волне заметно увеличение энтропии даже при маленьком шаге (Фиг.3.24 и Фиг.3.25).



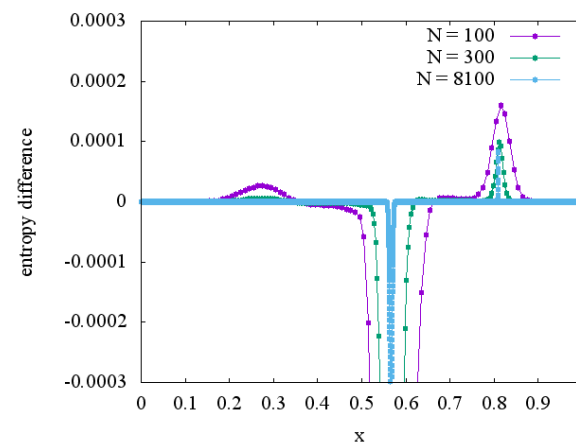
**Фиг.3.22** Распад разрыва с волной разрежения и ударной волной. Давление.  $t = 0.22$



**Фиг.3.23** Распад разрыва с волной разрежения и ударной волной. Плотность.  $t = 0.22$



**Фиг.3.24** Распад разрыва с волной разрежения и ударной волной. Энтропия.  $t = 0.22$



**Фиг.3.25** Распад разрыва с волной разрежения и ударной волной. Разница в энтропии для  $t = 0.22$  и  $t + \tau$

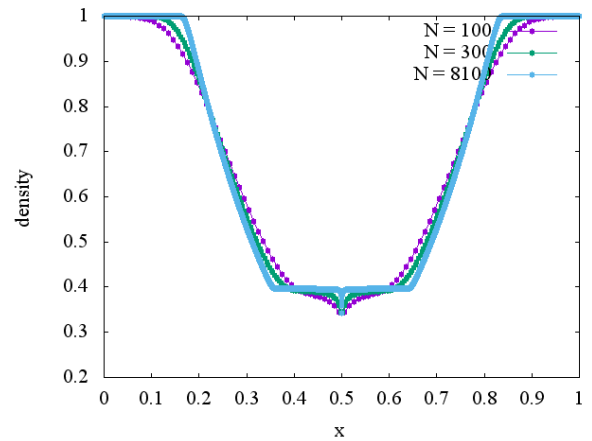
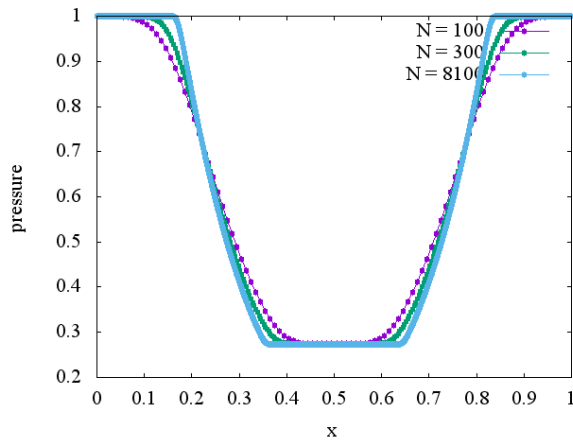
### 3.2.4.2 Конфигурация с двумя волнам разрежения

Точные разрывные (кусочно-постоянные) начальные условия для моделирования текущей конфигурации будут иметь вид (см. **Таб. 3.3**):

	$x < x_0$	$x > x_0$	контактный разрыв (решение)
давление	1.00	1.00	0.27
плотность	1.00	1.00	0.34
скорость	1.00	1.00	0.00

**Таб. 3.3** Начальные условия для задачи с двумя волнам разрежения

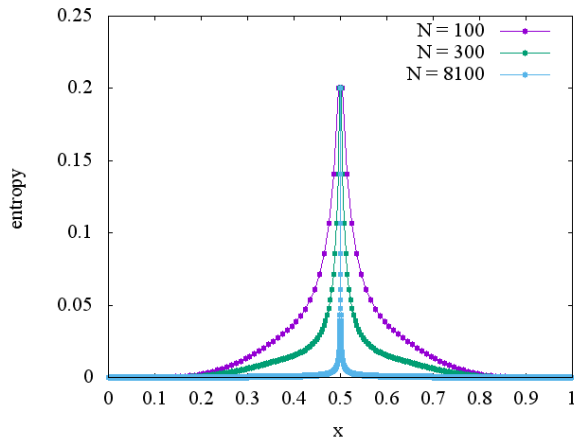
Приведем графики давления и плотности (**Фиг.3.26** и **Фиг.3.27**). Обратим внимание на разностный эффект в точке разрыва  $x_0 = 0.5$  в виде «хвостика» на графике плотности. Видно, что ширина этой погрешности уменьшается с каждым измельчением сетки, хотя однозначно будет влиять на точность решения в этой зоне.



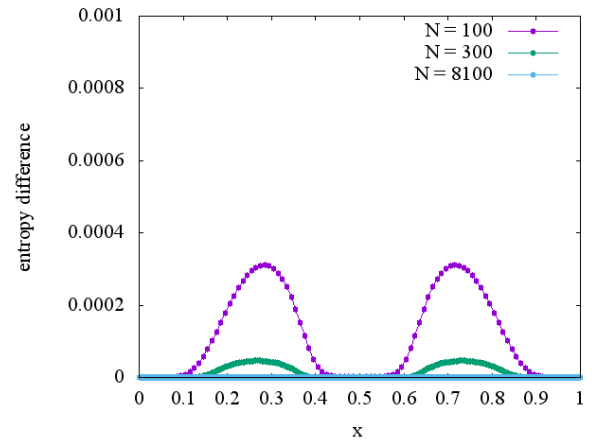
**Фиг.3.26** Распад разрыва с двумя волнами разрежения. Давление.  $t = 0.22$

**Фиг.3.27** Распад разрыва с двумя волнами разрежения. Плотность.  $t = 0.22$

График энтропии изображен на **Фиг.3.28**. В точке разрыва  $x_0 = 0.5$  наблюдается наибольший отрыв разностного решения. Однако в этой зоне не наблюдается повышение энтропии **Фиг.3.29**. Увеличения энтропии присутствуют лишь в зонах волн разрежения, которые убывают при измельчении шага сетки.



**Фиг.3.28** Распад разрыва с двумя волнами разрежения. Энтропия.  $t = 0.22$



**Фиг.3.29** Распад разрыва с двумя волнами разрежения. Разница в энтропии для двух последующих  $t = 0.22$  и  $t + \tau$

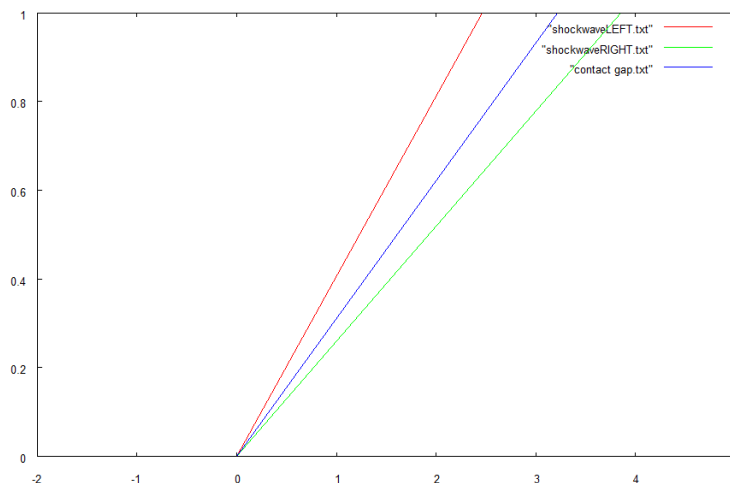
### 3.2.4.3 Конфигурация с двумя ударными волнами

Последняя конфигурация задачи Римана о распаде произвольного разрыва включает в себя образование *двух ударных волн*. Обе ударные волны распространяются вправо. Начальные данные представлены в таблице ниже (см. **Таб.3.4**):

	$x < x_0$	$x > x_0$	контактный разрыв
давление	2.00	1.00	5.55
плотность	3.00	2.00	6.035 / 5.939
скорость	4.00	2.00	3.228

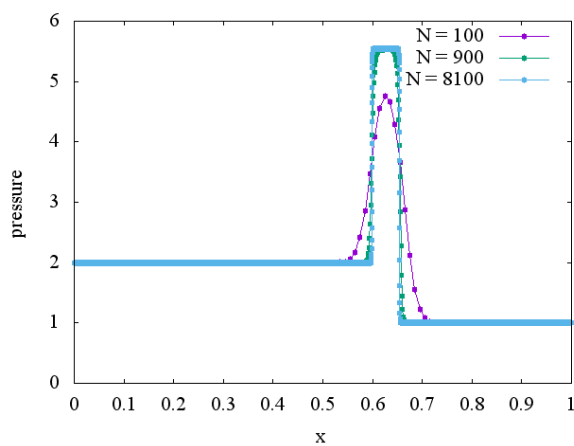
**Таб.3.4** Начальные условия для задачи с двумя волнам разрежения

Аналитическое решение на плоскости  $R^2(x, t)$  представлено на **Фиг.3.30**

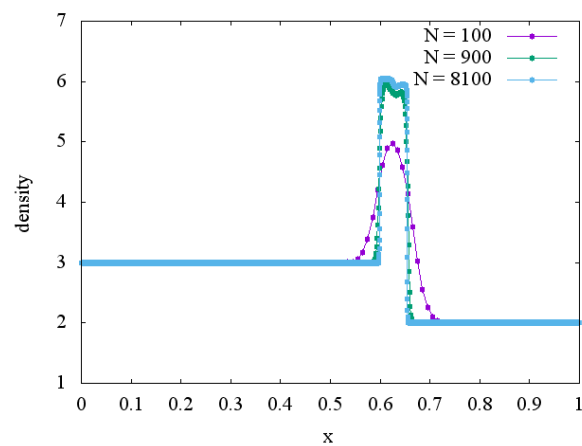


**Фиг.3.30** Аналитическое решение на плоскости  $R^2(x, t)$  конфигурации с двумя ударными волнами

Численное решение показано на **Фиг.3.31** и **Фиг.3.34**. При 100 точках сетки амплитуда волны немного меньше, чем при 900 и 8100 точек сетки в выбранный момент времени. Это показывает, что при не очень большом числе точек волне требуется немного больше времени, чтобы выйти на нужную амплитуду волны.



**Фиг.3.31** Распад разрыва с двумя ударными волнами. Давление.  $t = 0.22$



**Фиг.3.32** Распад разрыва с двумя ударными волнами. Плотность.  $t = 0.22$



### 3.2.5 Обобщение метода Годунова с линейными распадами разрывов на двумерный случай

Обобщив на двумерный случай принципы построения одномерного метода, получилась следующая схема вычисления потоков на гранях вычислительных ячеек.

Приведем формулы в направлении оси  $X$  для потоков:

$$P_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\frac{p_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} + \frac{p_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\rho_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} + u_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n - u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} + \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}} \quad (3.69)$$

$$U_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n u_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n + \rho_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n + p_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n - p_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n + \rho_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}$$

$$V_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \begin{cases} v_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n, & \text{if } U_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n, & \text{if } U_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.70)$$

$$R_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n \left( 1 - \frac{U_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} \right), & \text{if } U_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ \rho_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n \left( 1 - \frac{u_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n - U_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{c_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} \right), & \text{if } U_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.71)$$

В направлении оси  $Y$  потоки считаются следующим образом:

$$P_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\frac{p_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} + \frac{p_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}{\rho_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n} + v_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n - v_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}{\frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} + \frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}} \quad (3.72)$$

$$V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n u_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n + \rho_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n u_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n + p_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n - p_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}{\rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n + \rho_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n c_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}$$

$$U_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \begin{cases} u_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n, & \text{if } V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ u_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n, & \text{if } V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.73)$$

$$R_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \rho_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n \left( 1 - \frac{V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} - v_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{c_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n} \right), & \text{if } V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ \rho_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n \left( 1 - \frac{v_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{c_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n} \right), & \text{if } V_{i-\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.74)$$

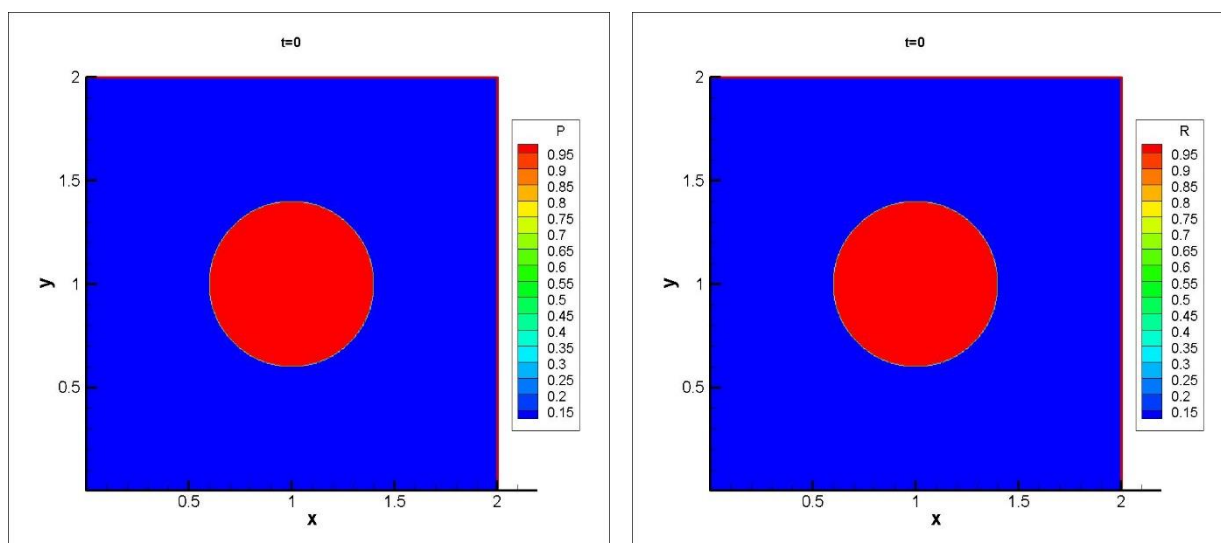
### 3.2.5.1 Численный эксперимент. Задача о взрыве

Двумерные уравнения Эйлера решаются в квадратной области в плоскости  $XU$ , покрытой сеткой  $200 \times 200$ . Начальные условия состоят из кругового разрыва радиуса 0,4 с центром в (1,1) [112]. Значения внутри и снаружи круга приведены в **Таб.3.5**.

	внутри	снаружи
плотность	1.0	0.125
x скорость	0.0	0.0
y скорость	0.0	0.0
давление	1.0	0.1

*Таб.3.5 Начальные данные для задачи о взрыве*

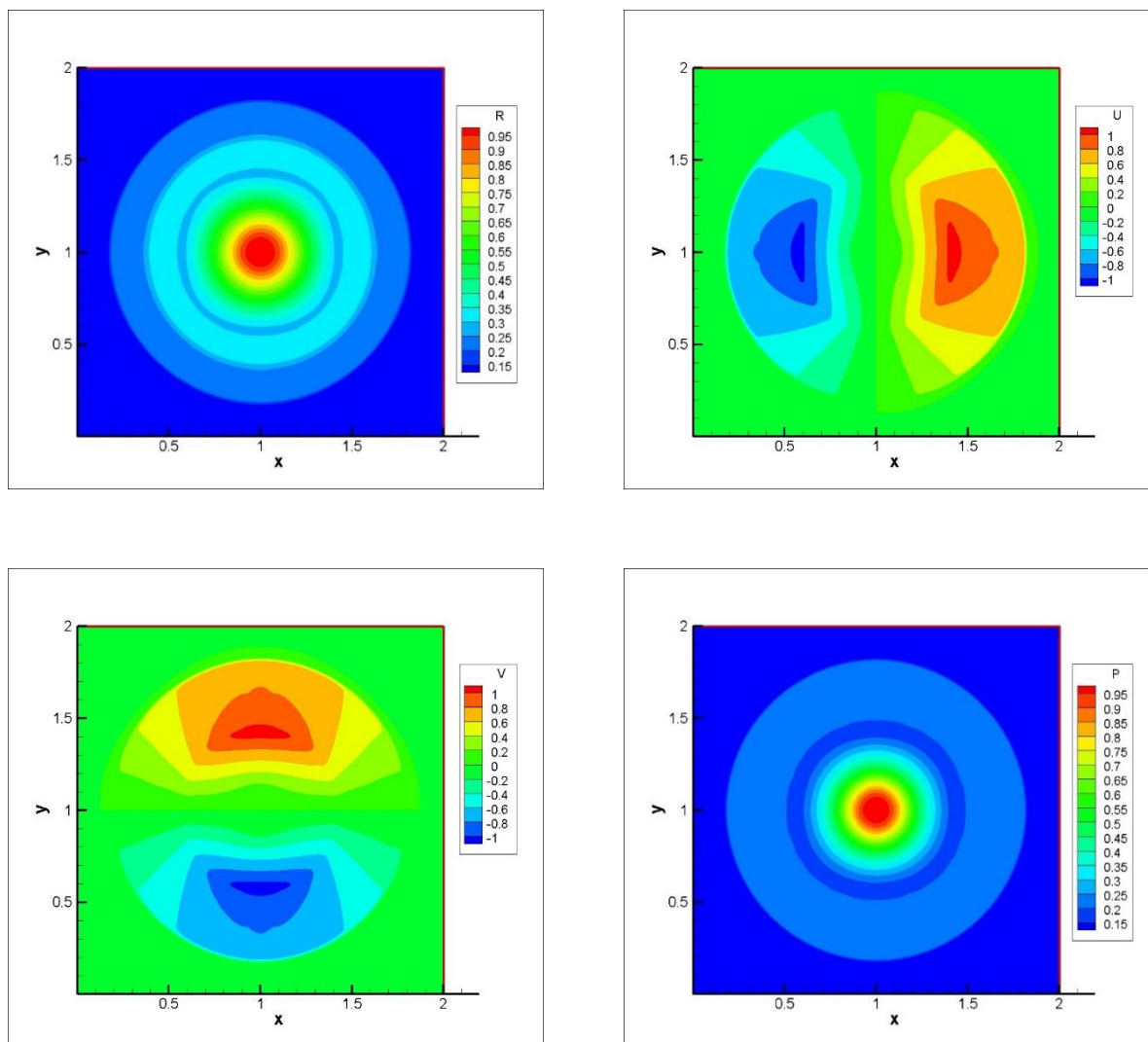
и показаны на **Фиг.3.33**. На данном рисунке представлено распределение давления в начальный момент времени  $t=0$ . Граничные условия являются условиями продолжения (outflow boundary conditions). Значение  $CFL = 0.4$ .



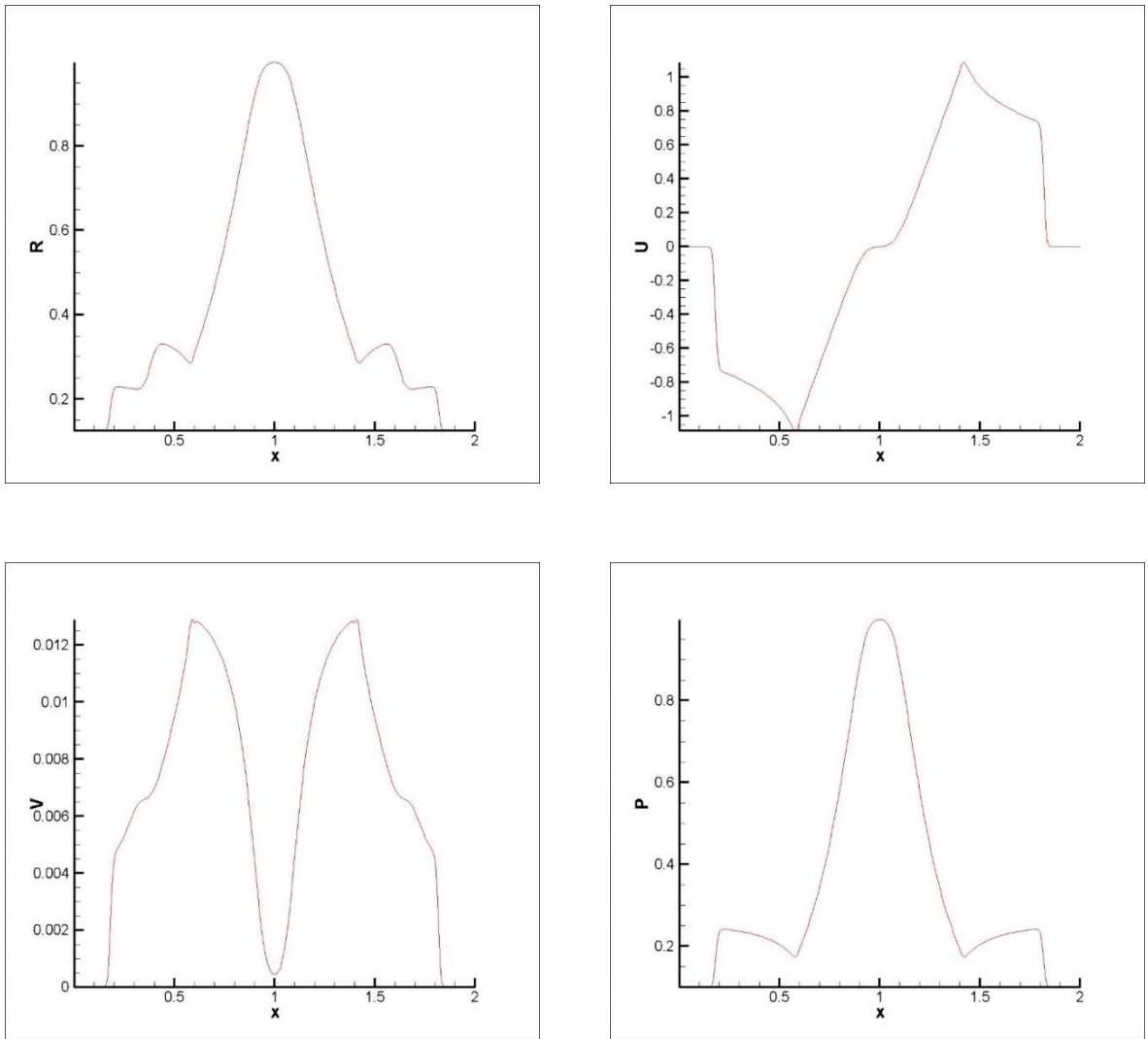
**Фиг.3.33** Начальное распределение давления и плотности

Решение имеет круговую ударную волну, распространяющуюся от центра, круговую поверхность контактного разрыва, движущегося в том же направлении, и круговую волну разрежения, распространяющуюся к началу координат (1,1). С течением времени возникает сложная волновая картина. Круговая ударная волна распространяется наружу и становится слабее. Поверхность контактного разрыва следует за ударной волной, в какой-то момент контактный разрыв останавливается и движется в обратную сторону.

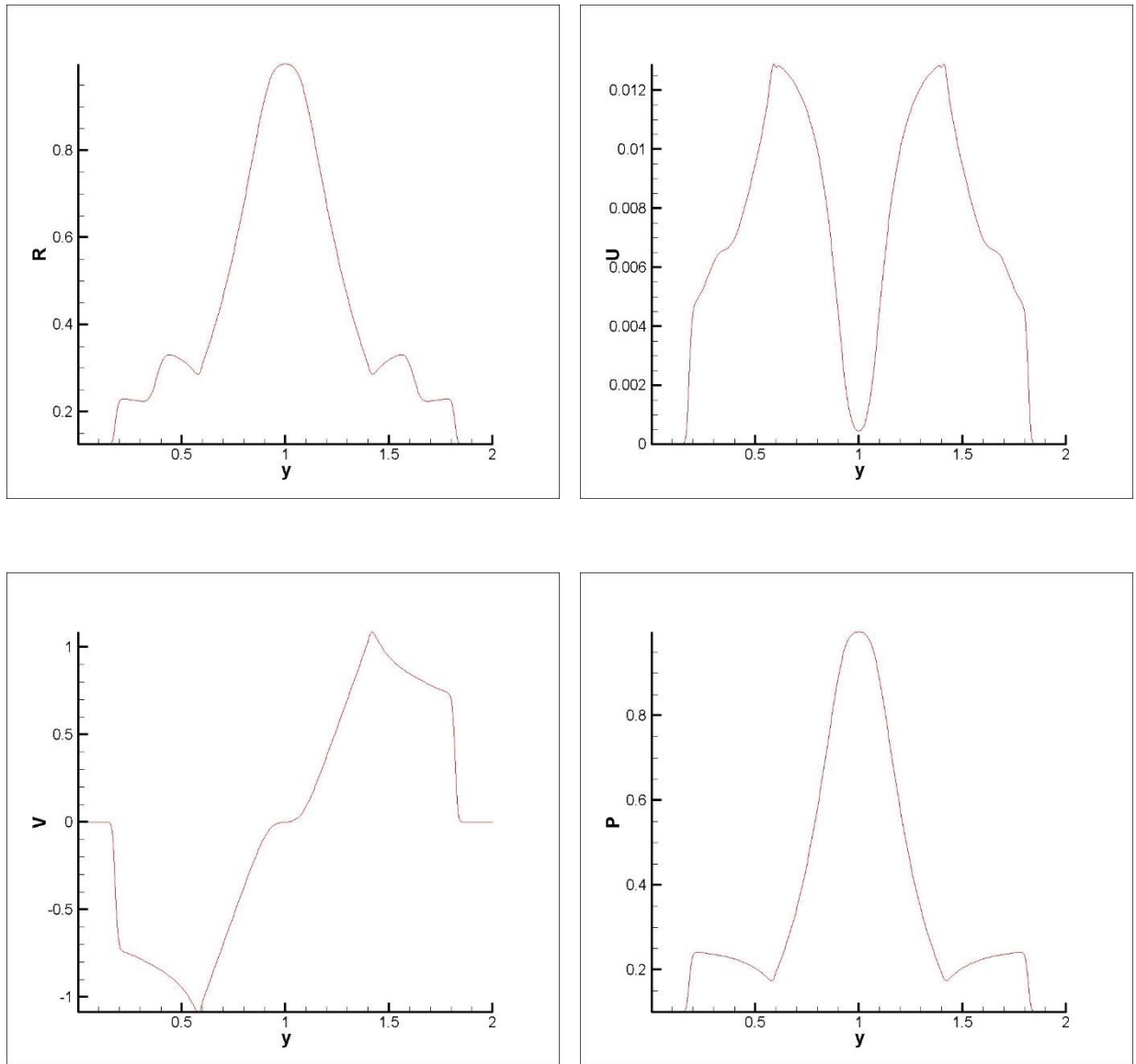
На **Фиг.3.34-Фиг.3.36** показано решение на момент времени  $t = 0.25$ , приведены как двумерные контуры различных гидродинамических величин, так и их одномерные графики в сечении  $x, y$ , взятом посередине каждой из осей расчетной области  $x=0.5$  или  $y=0.5$ . Сравнив **Фиг.3.35-Фиг.3.36.3.36** с результатами из [111] (стр. 589) и [120], увидим достаточно точное сходство, свидетельствующее о правильности работы тестируемого метода.



**Фиг.3.34** Распределение плотности ( $R$ ),  $x$ -,  $y$ - компонент скорости ( $U, V$ ) и давления  $P$  в момент времени  $t = 0,25$



**Фиг.3.35** Распределение плотности ( $R$ ),  $x$ -,  $y$ - компонент скорости ( $U, V$ ) и давления  $P$  в сечении  $x = 0,5$  в момент времени  $t = 0,25$



**Фиг.3.36** Распределение плотности ( $R$ ),  $x$ -,  $y$ - компонент скорости ( $U, V$ ) и давления  $P$  в сечении  $y = 0,5$  в момент времени  $t = 0,25$

### Выводы

Описана частично линеаризованная редакция классической схемы с нелинейными распадами, в которой распады заменены их упрощенными вариантами. Предлагаемый вариант схемы обладает свойством гарантированного неубывания энтропии.

В настоящей главе исследованы задачи о сильных распадах разрывов. Показано, что решение обсуждаемых задач по обсуждаемой схеме на мелких сетках не приводит к каким-либо сложностям или неожиданным эффектам.

Показаны зависимости ширины ударных волн и времени их образования от выбора числа Куранта и шага расчетной сетки.

На задаче о взрыве протестирована линеаризованная схема Годунова, обобщенная на двумерный случай.

## ГЛАВА 4 ПАКЕТ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ HYPERBOLIC\_SOLVER ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ, ОПИСЫВАЕМЫХ СИСТЕМАМИ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ТИПА

В данной главе представлен пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** для численного моделирования задач, описываемых системой уравнений гиперболического типа. Обобщенный подход к построению вычислительных программ, который использовался при создании данного комплекса, состоит из использования независимых программных блоков для различных частей расчетной методики и решаемых физических задач. В рамках одной структуры пакет программ позволяет моделировать задачи, описывающие разнообразные физические процессы. Для их решения пользователь имеет возможность применять различные численные методы и блоки программы, в которых описаны специфические для конкретной задачи граничные и начальные условия, массовые силы и уравнения состояния вещества.

Пакет **HYPERBOLIC\_SOLVER** тестировался на платформах: Intel, Param, MBC-1000, с операционными системами: Windows, Solaris, Linux, использовались следующие реализации MPI: WMPI, MPICH. Пакет прикладных программ имеет государственную регистрацию N 2013618035 TURBULENCE PROBLEM SOLVER, 2013.

При работе над данным разделом диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования:

- Фортова С. В., Крагинский Л. М., Чикиткин А.В., Опарина Е.И., Программный пакет для решения гиперболических систем уравнений // Математическое моделирование. – 2013, том 25, № 5, с. 123-135.
- Белоцерковский О.М., Фортова С.В., Макропараметры пространственных течений в свободной сдвиговой турбулентности // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2010, том 50, № 6, с. 1-14.
- Белоцерковский О.М., Фортова С.В., Исследование каскадного механизма развития турбулентности в свободно- сдвиговом течении // Доклады АН. – 2012, том 443, № 1, с. 1-4.
- Долуденко А.Н., Фортова С.В., Численное моделирование Релей-Тейлоровской неустойчивости невязкой и вязкой средах // Журнал



вычислительной математики и математической физики. – 2015, том 55, № 5, с. 876–885.

- Utkin, P.S., Fortova, S.V., Mathematical modeling of impact of two metal plates using two-fluid approach // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 946, 012047.

#### 4.1 Описание программного пакета **HYPERBOLIC\_SOLVER**

Созданный для численного моделирования нестационарных 3D гидродинамических явлений [79,80], пакет программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** был применен для решения таких практически важных задач, как моделирование высокоскоростного соударения металлических пластин, исследование воздействия фемтосекундного лазерного излучения на металлические подложки, развитие Неустойчивости Рэлея-Тейлора, формирование вихревого каскада в сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды, решение задачи Колмогорова [81-84,117,120].

Пакет представляет собой программный каркас [78,79,121], то есть собрание функций, интерфейсов и классов-прототипов, в которых пользователь имеет возможность реализовать специфический код для своей задачи. В пакете используется стандартный интерфейс обмена сообщениями MPI (Message Passing Interface) [122], благодаря чему пакет может быть применен под управлением различных операционных систем. Программный код, который написан на языке C++, не изменяется. Существует несколько библиотек с обменом сообщениями PVM, MPI и BSP. MPI [122] является наиболее распространенной, стандартной, удобной и часто применяемой при составлении параллельных программ, библиотекой для обмена сообщениями. Стандарт библиотеки MPI обладает широким набором средств по обмену сообщениями удобным пользовательским интерфейсом. Библиотека MPI предназначена для программирования MPP-, SMP-, кластерных и гетерогенных систем и используется совместно с различными языками программирования: Fortran, C, C++. Наличие множества функций для обеспечения и организации индивидуальных и коллективных взаимодействий позволяет библиотеке MPI поддерживать все типы данных указанных языков программирования. Благодаря наличию стандартного набора библиотечных процедур для передачи и приема сообщений MPI-программа может функционировать как автономный процесс, состоящий из своих собственных программ, которые взаимодействуют между собой при помощи средств MPI. Базовым коммуникационным механизмом MPI являются операции отправки и

приема сообщений между двумя процессами. В MPI реализован целый набор таких функций. Базовыми коммуникативным MPI-подходами, популярными в среде исследователей и позволяющими создавать эффективные программы, являются операции отправки и приема сообщений между двумя процессами.

Модель программирования SPMD (Single Program, Multiple Data), используемая в пакете программ, одновременно выполняет несколько копий одной программы на разных процессорах параллельно. Каждый процесс программы выполняет одну и ту же программу, но в зависимости от своего номера выполняет свою часть вычислений. Ввод/вывод данных задачи и управление другими процессами осуществляет один мастер-процесс, который кроме этого выполняет общую для всех процессов вычислительную часть. Достоинством этой модели является то, что нужно поддерживать только одну версию программного кода, который к тому же не зависит от количества процессоров, при этом количество процессоров задается в качестве параметра. Запуск программы возможен как на одном процессоре, так и на кластере машин с различными операционными системами при использовании соответствующих реализаций MPI.

При использовании данного пакета основная масса программного кода является последовательной. Для применения параллельной версии программы необходимо зафиксировать выделенное количество программных частей, относящихся исключительно к методике распараллеливания данных [78-80]. Основная из них приходится на этап инициализации и завершения работы параллельной части программы и состоит из распределения по процессорам части сеточного шаблона; раздачи основных параметров задачи; сбора расчетных данных с каждого процессора; выбора минимального шага по времени, определенных из условия Куранта; суммирование в процессе подсчета интегральных величин законов сохранения; обмен перекрывающимися частями расчетных данных в процессе установки граничных условий.

Декомпозиция по трем пространственным переменным, которая реализована в пакете программ, приводит к объему обменов порядка  $3\sqrt[3]{N}$ . При этом параметры декомпозиции выбираются пользователем.

Для использования в разных типах коммуникаций: мастер-подчиненный (master-slave), процессы-соседи в сети процессов, определены несколько типов данных:

- тип, описывающий коллективные расчетные переменные, (используется

только на мастер-процессе),

- тип, описывающий локальные расчетные переменные,
- типы, описывающие перекрывающиеся части расчетных данных (по трем разным направлениям  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ).

Основным коммуникационным механизмом в MPI являются операции отправки и приема сообщений между двумя процессами. В стандартном MPI могут быть использованы следующие основные функции:

- Блокирующие функции: в них операции отправки и приема данных блокируются до момента освобождения буферов.
- Неблокирующие функции: в них операции отправки и приема позволяют частично совмещать операции по обмену данными.
- Функции передачи без блокировки: в них фиксируется момент начала передачи, но не момент ее завершения. Использование неблокирующих функций приема/передачи позволяют совмещать (перекрывать) вычисления и коммуникации.

Блокирующий режим передачи данных применяется обычно для коммуникаций типа мастер-подчиненный. Самому себе мастер-процесс посылает данные путем их прямого копирования. Между процессами-соседями обмен данными происходит с помощью неблокирующей операции `SendRecv`. Для нестандартных реализаций MPI операция `SendRecv` заменяется на попарно чередующиеся `Send` и `Recv`. При использовании нестандартных реализаций MPI проводятся дополнительные проверки, позволяющие избежать появления операций с `MPI_PROC_NULL` [78].

Число и вид расчетных компонент могут быть параметризованы путем использования векторных операций с расчетными компонентами и потоками, а также введением функций, вычисляют матрицы собственных векторов и собственные числа матрицы Якоби задачи. Такие настройки программы, как начальные, граничные условия, правые части уравнения и уравнения состояния вещества определены в отдельных блоках программы. При этом программный интерфейс позволяет определять альтернативные способы задания этих настроек, не модифицируя остальные части программного комплекса. Пользователь также может добавить свои численные разработки в существующую программу. Если новый метод основан на общей схеме вычисления потоков, то для введения его в комплекс программ необходима частичная модификация в определенной части программы, посвященной собственно расчетному методу [78-80].

В программе существует несколько типов параметров: скалярные, векторные и функциональные. Для численного моделирования новой физической задачи требуется задать скалярные параметры и некоторое число функций, определяющих особенности поставленной задачи.

К скалярным параметрам относятся:

- число компонент расчетного массива данных,
- числа, определяющие декомпозицию по направлениям  $x$ ,  $y$  и  $z$ ,
- размеры расчетной области и сеточного шаблона,
- расчетное время в задаче,
- число Куранта и другие параметры.

К векторным параметрам относятся:

- начальные данные,
- сеточный шаблон.

Существуют так же функциональные и алгоритмические параметры, реализуемые в виде функций с определенным интерфейсом. Пользователь может задавать свои функциональные и алгоритмические параметры, используя заданный в комплексе программ интерфейс. Среди этих параметров:

- задание граничных условий,
- функции задания матриц собственных векторов и вектора собственных чисел матрицы Якоби,
- функции замены координат,
- задание массовых сил и источников,
- алгоритм расщепления,
- сам конечно-разностный метод,
- функция энтропийной коррекции,
- алгоритм искусственного сжатия,
- функция-ограничитель (для приближенных Римановских солверов),
- функция, задающая псевдовязкость.

При использовании описываемого в данной работе пакета программ решаются следующие задачи, и обеспечиваются следующие преимущества:

- сокращается срок разработки новых программных приложений,
- осуществляется повторное использование кода,
- эффективно используются многопроцессорные вычислительных системы,
- есть возможность быстро переключиться на альтернативный метод,
- может использоваться объектно- и компонентно-ориентированный подход к разработке приложений,
- есть возможность построения и дальнейшего использования специализированной интегрированной среды для быстрой разработки приложений для стандартных моделей,
- пользователи работают только с последовательной частью программы – параллельная часть прозрачна для них, и им нет необходимости разбираться с параллельным программированием.

#### **4.2 Объектно- ориентированный подход к реализации пакета программ `HYPERBOLIC_SOLVER`**

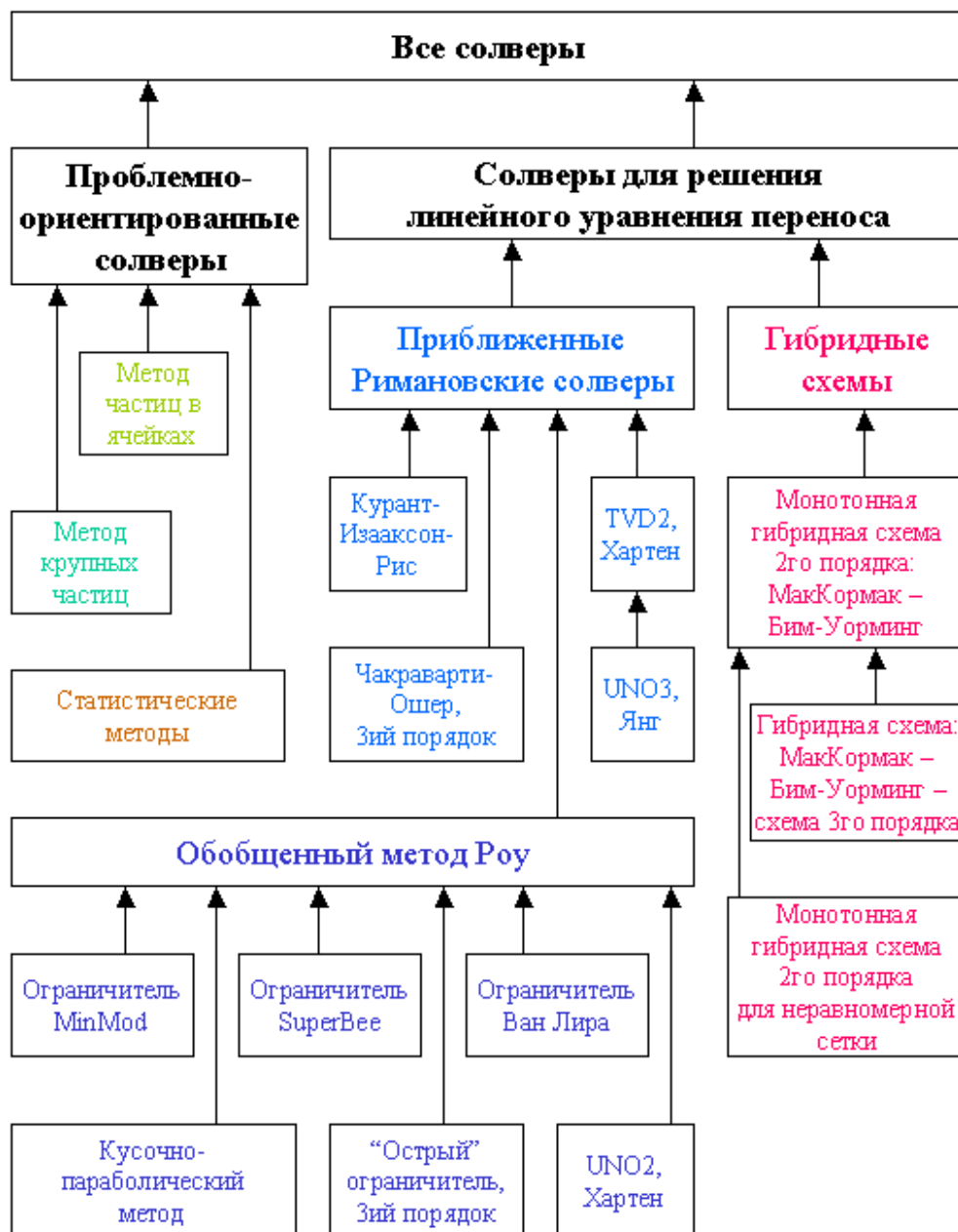
Для удобства использования указанного многообразия численных методов и наличием большого числа дополняющих параметров, для программной реализации пакета программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** используется объектный подход [123] и базовые объекты (классы собственной разработки) на языке C++ с использованием коммуникационного пакета MPI.

Отдельными программными классами описываются такие части методики, как конечно-разностная схема, тип осреднения, вид расщепления по пространственным переменным, энтропийная коррекция и прочие [78-80]. Данный подход позволяет комбинировать и объединять уже существующие программные блоки, которые описываются в виде классов, в необходимую именно для данной задачи программу. Тем самым, один раз созданные и протестированные классы, можно повторно использовать в других вариантах программы.

Введем понятие солвера – это фиксированный по всем параметрам, классам и подпрограммам вариант результирующей программы, который решает конкретную физическую задачу. Разные солверы могут иметь различные параметры. К примеру, параметр функции-ограничителя существует только в приближенных Римановских методах и отсутствует в других методиках. Объектно-ориентированный подход достаточно удобно учитывает это обстоятельство, не меняя логической структуры программы.

Если рассматривать солверы как абстрактные типы данных, то можно построить дерево наследования классов, которое реализует всевозможные солверы. Основываясь на этой логике, в рамках одной программы у пользователя имеется возможность одинаково использовать такие разные методы как метод крупных частиц и какой-либо из сеточно-характеристических методов. Имея разные алгоритмы и совершенно разные наборы параметров, они являются реализациями одного абстрактного типа данных, описываемого классом `NMethod`. При этом для остальных частей программы этот класс имеет один и тот же интерфейс [78].

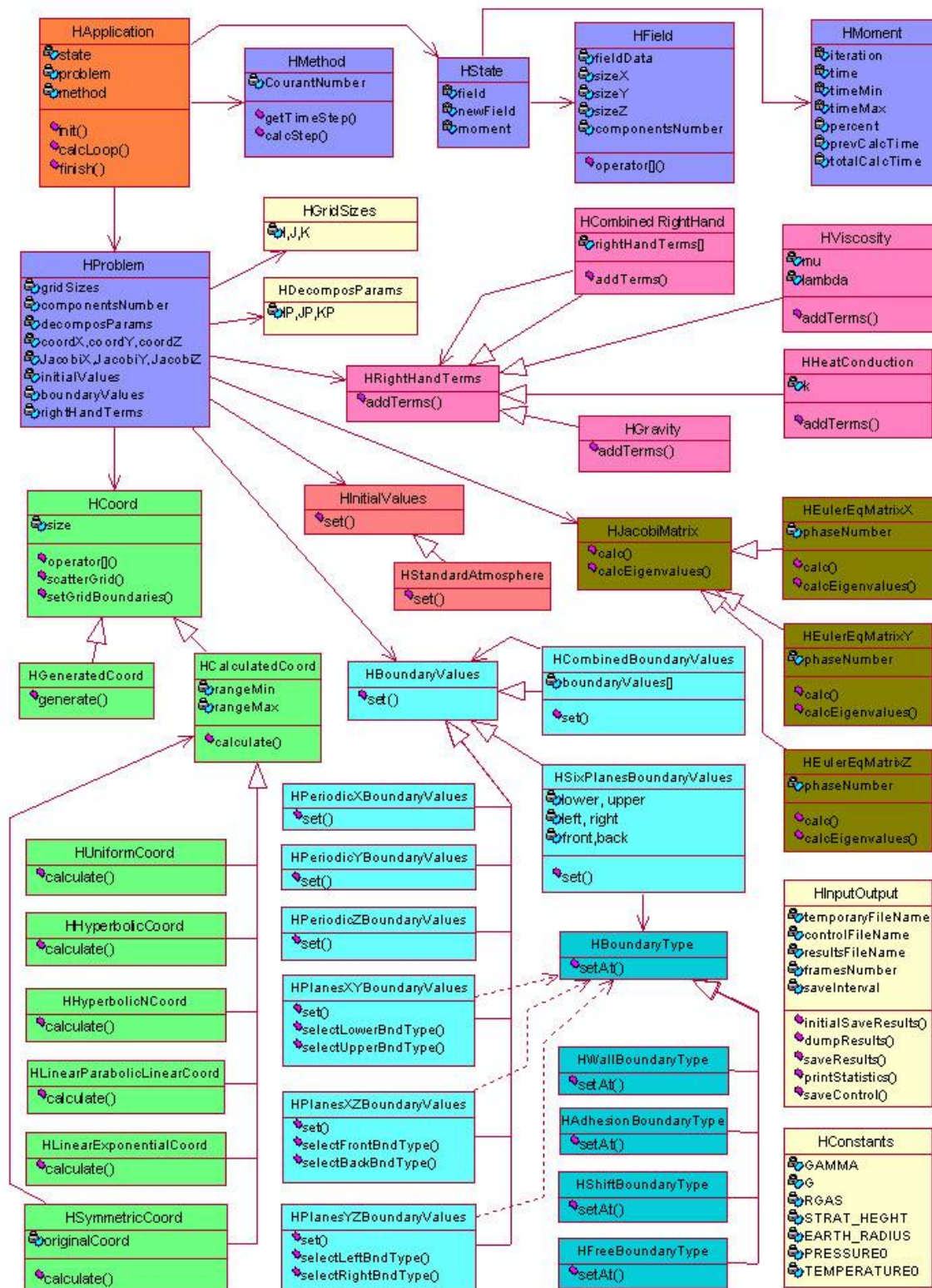
## Дерево наследования солверов



Фиг.4.1 Дерево наследования солверов

На Фиг.4.1 изображено дерево наследования солверов, содержащие существующие в комплексе программ численные методики. Большинство показанных методик являются приближенными Римановскими солверами с различного вида ограничителями, сильно меняющими свойства метода. Так же используются гибридные схемы, обладающие высоким порядком

аппроксимации по пространству и по времени. Отдельным направлением представлены метод крупных частиц, метод частиц в ячейках, статистические методы и другие методы, основанные на решении уравнений определенного вида.



Фиг.4.2 Структура пакета прикладных программ



На **Фиг.4.2** показана структура всего разрабатываемого пакета в виде диаграммы классов. Входной точкой для выполнения вычислений является процедура `calcLoop()`.

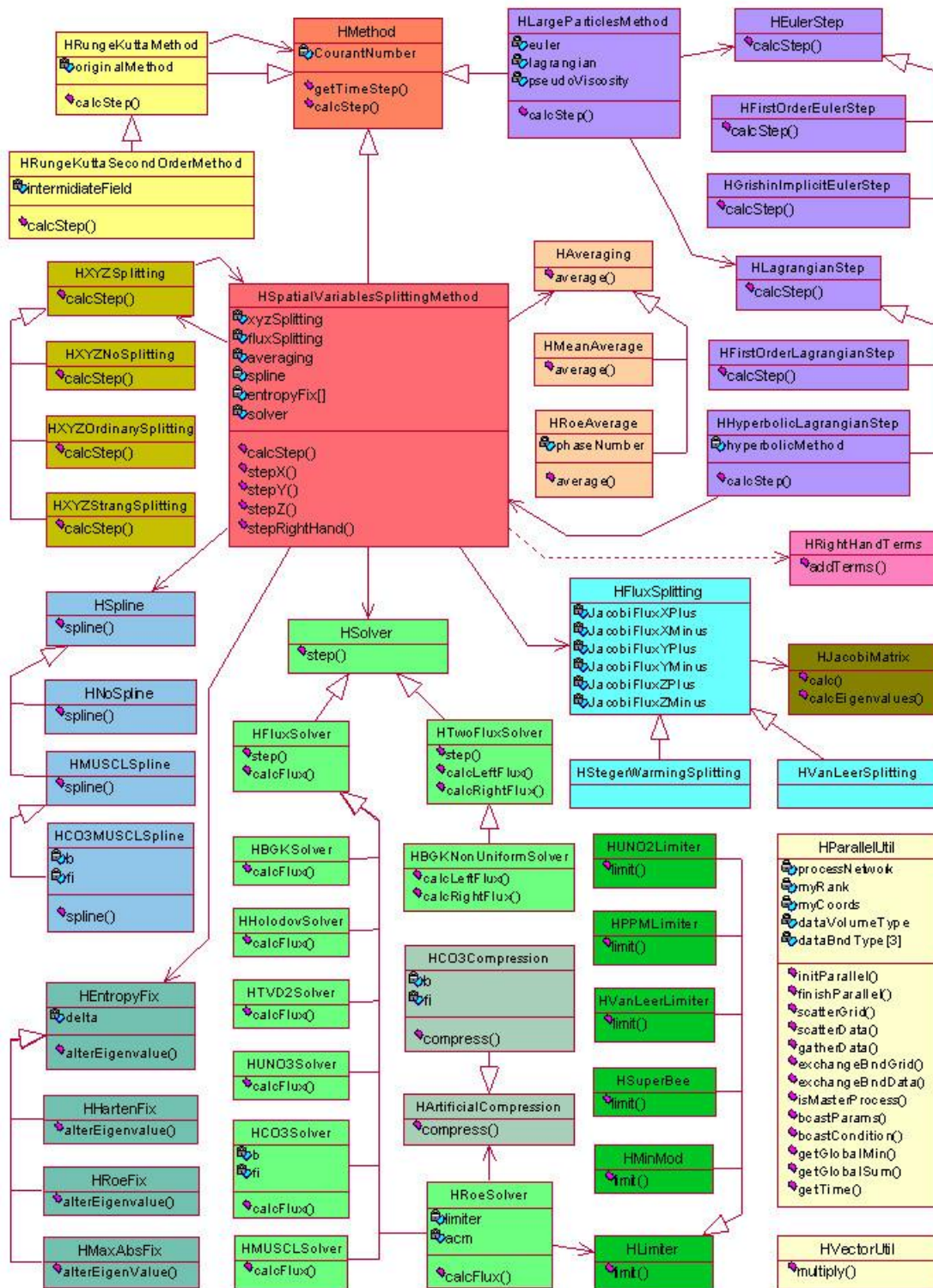
Перечислим основные классы пакета:

- `HApplication`,
- `HProblem`, описывает физическую постановку решаемой задачи,
- `HMethod`, представляет численный метод для решения этой задачи,
- `HState`, хранит расчетные данные и содержит решение задачи в настоящий и предыдущий моменты времени (объекты класса `HField`) параметры, определяющие расчетные переменные в текущий момент времени (класс `HMoment`).

Опишем эти классы более подробно.

Класс `HProblem` содержит физическую постановку задачи (координаты, размер сетки, количество расчетных компонент, параметры декомпозиции, начальные условия, граничные условия, вид уравнений, правая часть уравнений и уравнения состояния вещества). Координаты описываются классом `HCoord`. Начальные условия зависят от конкретной постановки и задаются пользователем в классе `HInitialValues`. Правая часть соответствует классу `HRightHandTerms`, и использует либо предоставленные пакетом стандартные классы: `HGravity` (наличие силы тяжести), `HViscosity` (наличие вязких членов), и `HHeatTransfer` (наличие теплопроводности) и класс `HStateEquation` (наличие различных уравнений состояния вещества). Существует возможность комбинировать правые части с помощью класса `HCombinedRightHand`. Для задания вида уравнений через матрицы Якоби частных производных потоков по расчетным переменным, предоставляются три объекта класса `HJacobiMatrix`. В этих объектах вычисляются матрицы Якоби потоков по трем направлениям, их собственные числа и собственные вектора. Для постановки граничных условий используются классы `HBoundaryValues`, которые являются главными для задания граничных условий. Пакет программ содержит стандартные типы граничных условий: непротекание (класс `HWallBoundary`), свободная граница (класс `HFreeBoundary`), прилипание (класс `HAdhesionBoundary`), снос (класс `HShiftBoundary`). Пользователь имеет возможность сам задавать новые типы граничных условий, наследуя абстрактный класс `HBoundaryType` [78-80].

На Фиг.4.3 отдельно от других классов изображена диаграмма классов для реализации численной методики.



Фиг.4.3 Диаграмма классов для реализации численной методики

1. Класс `HMethod` является базовым классом для всех численных методов. Он содержит в себе метод `calcStep()`, вызываемый на каждой временной итерации программы. В пакете программ описано несколько методов, использующих расщепление по пространственным переменным. Для них используется реализация класса `HMethod` – класс `HSpatialVariablesSplittingMethod`. Отдельно описан метод крупных частиц, так как он имеет иную логику тип расщепления: на эйлеров и лагранжев шаг. Данный метод представлен классом `HLargeParticlesMethod`, содержащим в себе два указанных метода для расчета на каждом этапе, описываемых классами `HEulerStep` и `HLagrangianStep`. Для решения уравнений переноса на лагранжевом этапе может быть применен основной метод с расщеплением по пространственным переменным со скалярными матрицами Якоби, используя класс `HHyperbolicLagrangianStep` путем обращения к `HSpatialVariablesSplittingMethod`. Во всех описанных в пакете программ численных методах используется один и тот же класс `HSpatialVariablesSplittingMethod`. Новые численные методики определяются пользователем путем задания новых алгоритмических параметров в классе `HSpatialVariablesSplittingMethod`. К ним относятся: тип расщепления по пространственным переменным, расщепление потоков, конечно-разностный метод для решения уравнения переноса, осреднение, аппроксимация, энтропийная коррекция. Каждый из этих параметров является объектом соответствующего абстрактного класса. Например, аппроксимация, осреднение и энтропийная коррекция определяются абстрактными классами `HSpline`, `HAveraging` и `HEntropyFix`, у которых есть стандартные реализации. Для осреднения расчетных компонент часто используются классы: `HMeanAverage` (выбор среднего арифметического компонент на границах ячеек) или `HRoeAverage` (использование осреднения по  $P_{\text{Oy}}$ ). Объект класса `HXYZSplitting` задает выбор типа расщепления по пространственным переменным. Данный класс тесно взаимодействует с основным классом `HSpatialVariablesSplittingMethod` – вызов его метода `calcStep()` происходит путем вызова `HXYZSplitting.calcStep()`. Здесь в определенном порядке вызываются методы `stepX()`, `stepY()`, `stepZ()` и `stepRightHand()` класса `HSpatialVariablesSplittingMethod`. Таким образом, в классе `HXYZSplitting` определяется часть метода, отвечающая за выбор расщепления по пространственным переменным. Поточное расщепление задается объектом класса `HFluxSplitting`. В нем определены шесть матриц Якоби,

соответствующих  $\mathbf{A}^\pm$ ,  $\mathbf{B}^\pm$  и  $\mathbf{C}^\pm$  (см. Главу 2) для потоков по каждому их направлений  $x, y, z$ .

2. В классе `HSolver` определен конечно-разностный метод для решения линейного уравнения переноса, который является главной составляющей частью большинства методик. Данный класс состоит из единственной процедуры `step()`, вычисляющей значение компонент на новом временном шаге в одной точке расчетной сетки. Так как основная часть используемых схем формулируются в виде схем с расчетом потоков, то класс `HTwoFluxSolver` имеет виртуальные методы для расчета потоков слева и справа `calcLeftFlux()` и `calcRightFlux()`. Тем не менее для консервативных схем экономнее производить в каждой точке расчет только одного потока, например, справа, а поток слева брать из результатов расчета предыдущей ячейки. Указанный подход описан в классе `HFluxSolver`. Данный класс имеет виртуальный метод `calcFlux()`, который определяется в классах, реализующих различные разностные схемы: `HUNO3Solver`, `HCO3Solver`, `HBGKSolver`, `HHolodovSolver`, `HTVD2Solver`, `HMUSCLSolver`, `HRoeSolver`.

Построенная объектная модель хорошо отражает описанную в Главе 2 методику. Каждая составляющая часть этой методики выделена в отдельный класс. Это позволяет сочетать различные части методики в разрабатываемых программах. Для каждой части предоставляемой пакетом программ методики выделен базовый абстрактный класс, определяющий интерфейс, который должен быть включен в реализациях данного класса. Это позволяет по мере развития добавлять в пакет новые методы, а пользователям реализовывать собственные методы, граничные условия, начальные условия и решать уравнения другого вида. Объектная модель построена таким образом, что альтернативный вариант метода можно выбирать на различном уровне иерархии классов: например, меняя лишь функцию-ограничитель, или же, определяя другой способ аппроксимации для MUSCL-солвера. С помощью этого удастся включить в общий подход метод крупных частиц и другие методы, находящиеся вне рамок подхода к решению гиперболических систем уравнений в частных производных.

Представленная объектная модель имеет самостоятельную ценность и может быть использована в других программах и пакетах численного моделирования.

### 4.3 Декомпозиция вычислительной области

Увеличение производительности суперкомпьютеров достигается путем параллельного исполнения нескольких процессов обработки данных на разных процессорах одновременно. Для эффективного применения высокопроизводительной многопроцессорной техники разрабатываются специальные параллельные алгоритмы и программы.

Можно выделить два источника параллелизма в задаче: параллелизм по управлению и параллелизм по данным. В первом случае изначально задачу можно разбить на независимые процессы обработки данных, например, коммуникации и вычисления. Во втором случае сами данные можно разделить на независимые части и производить их обработку независимо. В численных методах решения дифференциальных уравнений в частных производных параллелизм по данным возникает естественным образом в силу наличия вычислительной сетки, каждый узел или группа узлов которой могут быть обработаны независимо.

Гиперболические системы уравнений характеризуются тем, что их решения обладают свойством локальности, т.е. за конечное время  $\tau$  изменение успеваает распространиться на расстояние  $\tau \cdot \max(|\lambda_k^A|)$ ,  $\tau \cdot \max(|\lambda_k^B|)$ ,  $\tau \cdot \max(|\lambda_k^C|)$  по осям  $x$ ,  $y$  и  $z$ , где  $\lambda_k^A$ ,  $\lambda_k^B$ ,  $\lambda_k^C$  – собственные числа матриц **A**, **B**, **C**. Таким образом, ограничивая шаг по времени  $\tau$ , соответствующий одной итерации

численного метода, условием Куранта

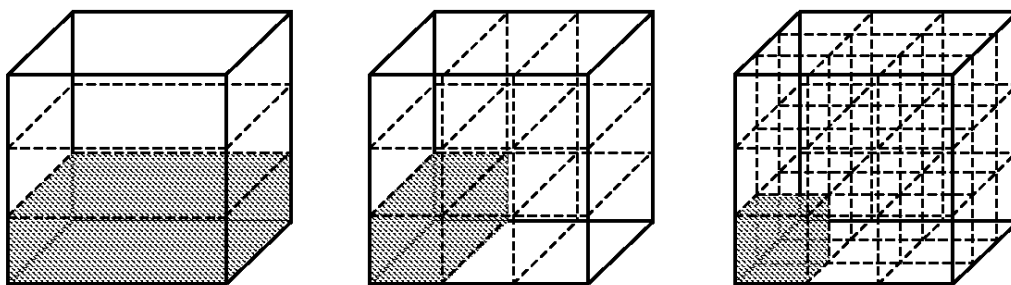
$$\tau \leq \frac{h_x}{\max(|\lambda_k^A|)}, \quad \tau \leq \frac{h_y}{\max(|\lambda_k^B|)},$$

$$\tau \leq \frac{h_z}{\max(|\lambda_k^C|)},$$

где  $h_x$ ,  $h_y$  и  $h_z$  – размеры ячейки, мы можем гарантировать, что

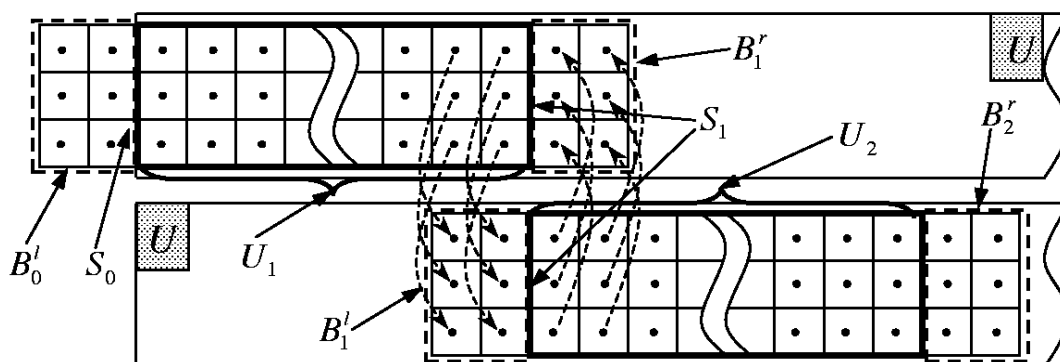
влияние изменения решения в одной ячейке распространяется за это время  $\tau$  лишь на ее соседние ячейки. Таким образом, практически любое разбиение расчетной области на группы соседних узлов будет удовлетворять свойству параллелизма по данным.

Чаще всего расчетная область представляет собой прямоугольник, параллелепипед или область, ограниченную отрезками, параллельными осям координат, наиболее удобным для реализации является разбиение на области, представляющие из себя одинаковые прямоугольники/параллелепипеды.



**Фиг.4.4** Различные варианты декомпозиции трехмерной области

На **Фиг.4.4** показана одно-, двух- и трехмерная декомпозиция трехмерной области, т.е. разбиение на прямоугольные области соответственно по одной, двум и трем координатам. Каждый такой параллелепипед можно к тому же обрабатывать одинаково, при этом одновременно с другими – на отдельном процессоре.



**Фиг.4.5** Схема обмена граничными точками каждого процессора

Точки непосредственно вблизи границы  $S_1$  области разбиения  $U_1$  (см. **Фиг.4.5**) вычисляются по общей схеме добавлением дополнительных точек  $B_1^r$ , лежащих за пределами области  $U_1$  так же, как это делается и для расчета приграничных точек основной разбиваемой области  $U$  – введением дополнительных точек  $B_0^l$ . Различие состоит в определении значений

расчетных компонент в этих внешних точках  $B_0^l$  и  $B_1^r$ . Для внешней границы разбиваемой области  $S_0$  они определяются из граничных условий; для точек, геометрически попадающих в какую-либо другую область декомпозиции  $U_2$ , значения расчетных компонент берутся из процесса, ответственного за порцию данных  $U_2$ .

При таком способе вычислений требуется:

- 1) Синхронизация процессов, исполняемых на разных процессорах;
- 2) Согласованный обмен данными, обрабатываемыми на разных процессорах. Это происходит либо непосредственно через общую разделяемую память, либо с помощью посылки сообщений. На **Фиг.4.5** пунктирными стрелками обозначены соответствующие обмены между процессами. Приведенная схема не является единственной возможной, например, можно было бы вовсе не иметь дублированных ячеек, и обмениваться значениями потоков через поверхности  $S_1$ ,  $S_2$  и т.д. Данная схема выбрана потому, что она позволяет расчет каждой ячейки проводить однородным образом.

Хотя основное процессорное время тратится на вычисление компонент в ячейках, при возрастающем количестве областей декомпозиции, заметную роль начинает играть время, затрачиваемое на обмены между вычислительными узлами. Оценим количество обменов при каждом виде декомпозиции и отношение времени, которое тратится на обмены, ко всему времени работы программы.

Пусть число ячеек области  $C = K^3$  (область – куб с ребром длины  $K$ ), при этом  $K$  кратно числу вычислительных узлов (процессоров)  $N$ , а  $N = M^2 = L^3$ . Тогда область можно разбить  $(N-1)$  параллельными плоскостями на  $N$  одинаковых слоев при одномерной декомпозиции,  $2(M-1)$  плоскостями ( $(M-1)$  параллельны плоскости  $XY$  и  $(M-1)$  – плоскости  $XZ$ ) на  $M^2$  областей для двумерной декомпозиции,  $3(L-1)$  плоскостями на  $L^3$  областей для трехмерной декомпозиции. В каждой из построенных областей содержится одинаковое число ячеек  $C/N$ , и, следовательно, время, затраченное собственно на вычисления по расчетной схеме, совпадает для всех трех видов декомпозиции. Но количество обменов  $N_{comm}$ , пропорциональное общей площади поверхности плоскостей сечения (с коэффициентом пропорциональности  $2qK^2$ , где  $q =$

количество расчетных компонент, умноженное на количество фиктивных ячеек вдоль одного направления), отличается и равно для одномерной декомпозиции:

$$N_{comm}^1 = 2q \cdot \sqrt[3]{C^2} (N-1) \sim 2qK^2N, \quad (4.1)$$

для двумерной:

$$N_{comm}^2 = 4q \cdot \sqrt[3]{C^2} (\sqrt{N}-1) \sim 4qK^2\sqrt{N}, \quad (4.2)$$

для трехмерной:

$$N_{comm}^3 = 6q \cdot \sqrt[3]{C^2} (\sqrt[3]{N}-1) \sim 6qK^2 \cdot \sqrt[3]{N}, \quad (4.3)$$

(при этом учитываются обмены в обе стороны).

Аналогичные вычисления можно провести и для случая расчетной сетки в виде параллелепипеда с ребрами разной длины:  $I, J, K$ . Пусть, для определенности,  $I \leq J \leq K$ . Тогда число ячеек  $C = I \cdot J \cdot K$ . Одномерную декомпозицию выгоднее всего делать по самому длинному ребру, в данном случае, в направлении  $K$ . Количество обменов в этом случае равно

$$N_{comm}^1 = 2qIJ(N-1) \sim 2qIJN. \quad (4.4)$$

Двумерную декомпозицию выгоднее делать по ребрам  $J$  и  $K$ . Однако, равное число плоскостей декомпозиции, как в случае кубической области, уже не является оптимальным. Пусть количества плоскостей, разбивающих всю область на подобласти, выделяемые одному процессору, в направлениях  $J$  и  $K$  равны соответственно  $(J_{proc}-1)$  и  $(K_{proc}-1)$ . Решетка процессоров имеет размеры  $J_{proc} \times K_{proc} = N$ . Для того, чтобы найти оптимальный выбор параметров декомпозиции нужно минимизировать значение функции

$$N_{comm} = 2q \cdot \left( IK(J_{proc}-1) + IJ(K_{proc}-1) \right)$$

при указанном условии на параметры декомпозиции. Подставляя значение для  $K_{proc} = \frac{N}{J_{proc}}$ , вычисляя производную

$N_{comm}$  по  $J_{proc}$  и приравнивая ее к нулю, получим оптимальные параметры двумерной декомпозиции:

$$J_{proc}^2 = \sqrt{N} \cdot \sqrt{\frac{J}{K}}, \quad K_{proc}^2 = \sqrt{N} \cdot \sqrt{\frac{K}{J}}, \quad (4.5)$$

$$N_{comm}^2 = 2q(2\sqrt{N} \cdot I\sqrt{JK} - IK - IJ) \sim 4qI\sqrt{JK}\sqrt{N}. \quad (4.6)$$



Для трехмерной декомпозиции определим решетку процессоров размеров  $I_{proc} \times J_{proc} \times K_{proc} = N$ . Количество обменов  $N_{comm}$  в этом случае равно  $N_{comm} = 2q \cdot (JK(I_{proc} - 1) + IK(J_{proc} - 1) + IJ(K_{proc} - 1))$ . Проводя аналогичные вычисления с нахождением условного экстремума (здесь нужно подставить  $K_{proc} = \frac{N}{I_{proc} \cdot J_{proc}}$ , а затем приравнять к нулю обе частные производные

получившегося выражения для  $N_{comm}$ : по  $J_{proc}$  и по  $I_{proc}$ ), получим:

$$I_{proc}^3 = \sqrt[3]{N} \cdot \sqrt[3]{\frac{I^2}{JK}}, \quad J_{proc}^3 = \sqrt[3]{N} \cdot \sqrt[3]{\frac{J^2}{IK}}, \quad K_{proc}^3 = \sqrt[3]{N} \cdot \sqrt[3]{\frac{K^2}{IJ}}, \quad (4.7)$$

$$N_{comm}^3 = 2q \left( 3\sqrt[3]{N} \cdot \sqrt[3]{I^2 J^2 K^2} - JK - IK - IJ \right) \sim 6q \cdot \sqrt[3]{C^2} \cdot \sqrt[3]{N}. \quad (4.8)$$

Как видно из формул, асимптотики в симметричном и несимметричном случае совпадают, причем, в случае трехмерной декомпозиции (а этот тип декомпозиции является самым эффективным) совпадают даже коэффициенты ( $6q \cdot \sqrt[3]{C^2}$ ) при показателе степени  $N$ . Из этого следует, что для целей обеспечения наибольшей эффективности распараллеливания размеры сетки по определенным направлениям не играют роли, а играет роль общее количество ячеек  $C$ . Поэтому без потери общности можно рассматривать симметричный случай.

#### 4.4 Эффективность расчетов

Время одной итерации программы  $T$  складывается из времени вычислений расчетных компонент во всех ячейках  $T_{calc}$  и времени, затрачиваемого на межпроцессные обмены  $T_{comm}$ . Пусть, время вычислений в одной ячейке равно  $\tau_{calc}$ , а время одного обмена  $\tau_{comm}$ . Тогда время работы на однопроцессорном компьютере  $T_1 = C\tau_{calc}$ , а на мультипроцессоре с  $N$  процессорами  $T_N = \frac{C\tau_{calc}}{N} + N_{comm}\tau_{comm}$ , где  $N_{comm}$  – количество обменов, зависящее от вида декомпозиции. Для количественной оценки эффективности распараллеливания пользуются следующими характеристиками [78,161]:

$$\text{ускорение (speedup)} \quad S(N, C) = \frac{T_N}{T_1}, \quad (4.9)$$

коэффициент масштабируемости (*efficiency*)  $E(N, C) = \frac{S}{N} = \frac{T_N}{N \cdot T_1}$ . (4.10)

В нашем случае,  $S(N, C) = \frac{N}{1 + \frac{N_{comm}}{C} \cdot k}$ ,  $E(N, C) = \frac{1}{1 + \frac{N_{comm}}{C} \cdot k}$ , где  $k = \frac{\tau_{comm}}{\tau_{calc}}$  –

отношение времени одного обмена к времени одной итерации в одной ячейке.

Обозначим  $S_1, E_1$ ,  $S_2, E_2$ ,  $S_3, E_3$  ускорения и коэффициент масштабируемости соответственно для одно-, двух-, и трехмерной декомпозиции. Подставляя

значения  $N_{comm}$ , получим

$$S_1(N, C) = \frac{N}{1 + 2qk \frac{(N-1)}{\sqrt[3]{C}}}, \quad E_1(N, C) = \frac{1}{1 + 2qk \frac{(N-1)}{\sqrt[3]{C}}}, \quad (4.11)$$

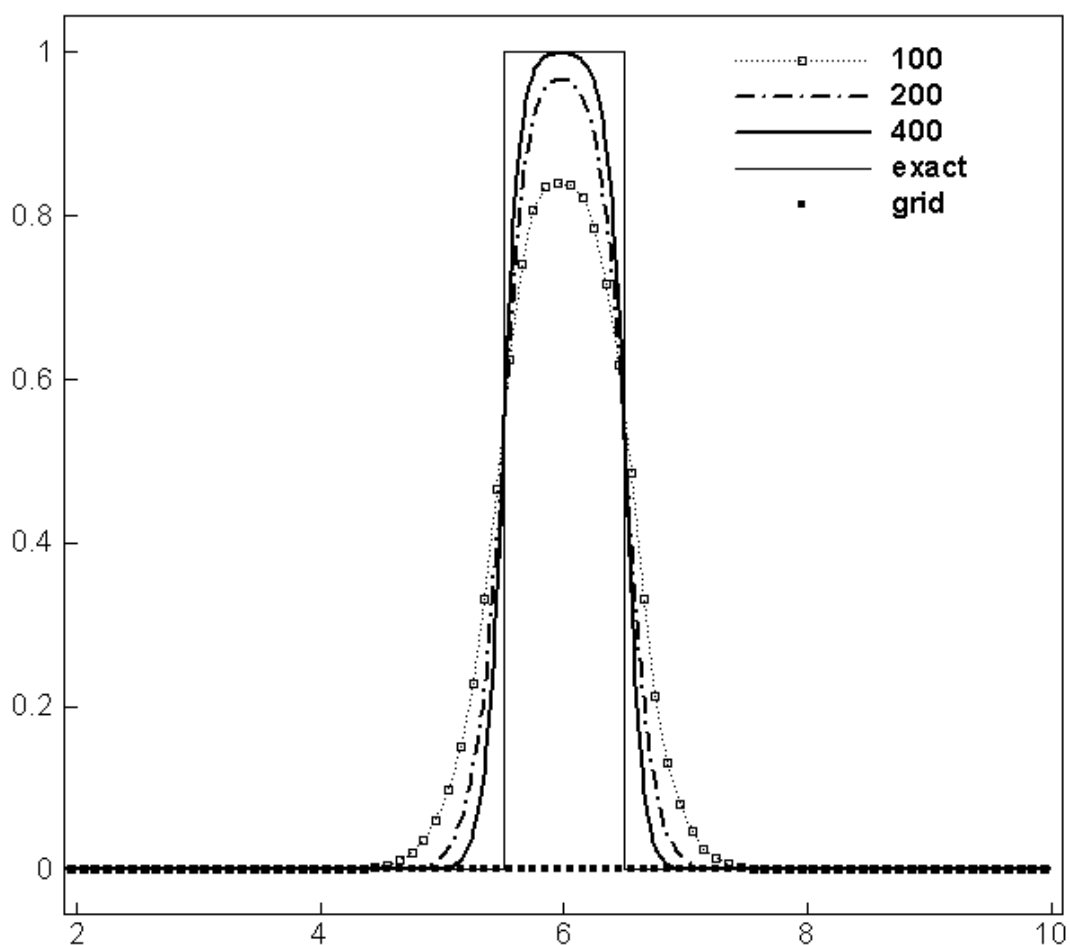
$$S_2(N, C) = \frac{N}{1 + 4qk \frac{(\sqrt{N}-1)}{\sqrt[3]{C}}}, \quad E_2(N, C) = \frac{1}{1 + 4qk \frac{(\sqrt{N}-1)}{\sqrt[3]{C}}}, \quad (4.12)$$

$$S_3(N, C) = \frac{N}{1 + 6qk \frac{(\sqrt[3]{N}-1)}{\sqrt[3]{C}}}, \quad E_3(N, C) = \frac{1}{1 + 6qk \frac{(\sqrt[3]{N}-1)}{\sqrt[3]{C}}}. \quad (4.13)$$

Наличие ненулевого  $k$  приводит к принципиальной невозможности достичь линейного ускорения по числу процессоров  $N$  при постоянном размере сетки  $C$ . Так, при одномерной декомпозиции ускорение  $S_1$  вообще всегда ограничено некоторой константой (зависящей от  $C$ ). В действительности же, поскольку  $k$  может быть достаточно малым, на отрезках значений  $N$  и  $C$ , применяемых на практике, вполне может достигаться значительный рост ускорения, хорошо приближаемый линейным, даже для одномерной декомпозиции.

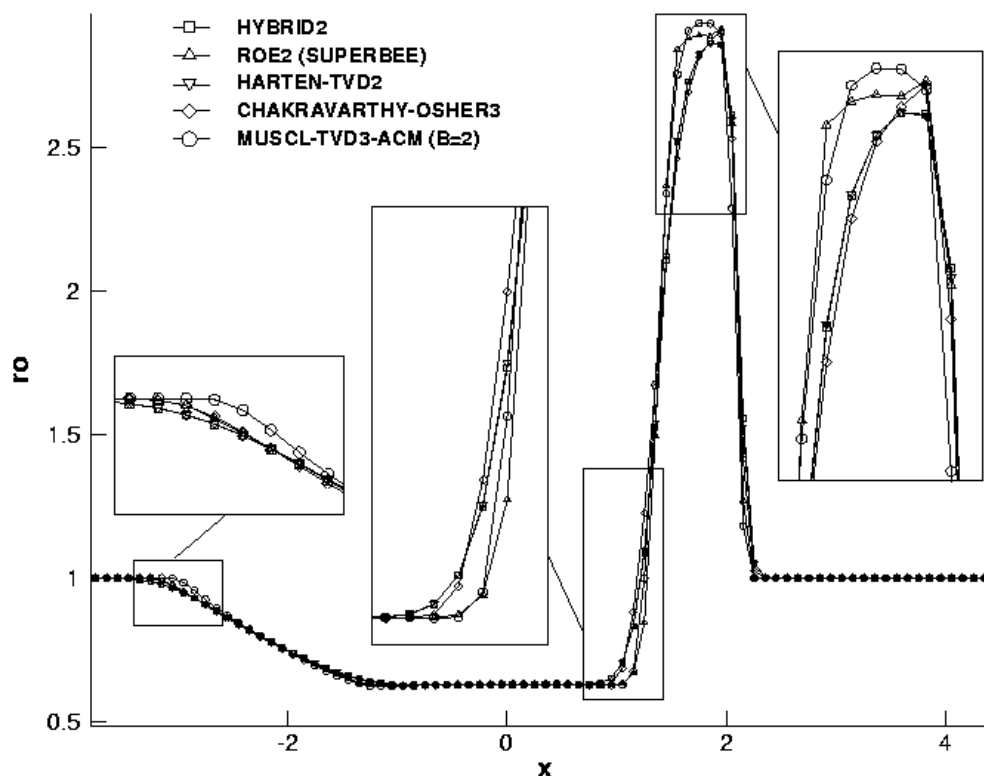
#### 4.5 Тестовые расчеты

Общепринятым способом тестирования является сравнение результатов расчета известных простейших постановок с результатами других расчетов и аналитическими данными. Описанный в этой главе пакет программ тестировался сперва на одномерной задаче о распаде разрыва для уравнения переноса [125].



**Фиг.4.6** Исследование сходимости монотонной гибридной схемы второго порядка

На **Фиг.4.6** представлено исследование сходимости монотонной гибридной схемы второго порядка. Скорость звука  $a = 1$ , начальные условия – ступенька, решение представлено при  $t = 5.5$ . Сеточный шаблон состоит из 100, 200, 400 точек. На ступеньку приходится соответственно 10, 20 и 40 точек. Количество шагов по времени при числе Куранта  $C = 0.1$  составляло соответственно 545, 1090, 2180.



**Фиг.4.7** Сравнение пяти различных схем

На **Фиг.4.7** показано сравнение пяти различных схем (монотонная гибридная схема второго порядка HYBRID2 [68,106], схема ROE2 Роу с ограничителем *SuperBee* [56], схема TVD2 Хартена [58], схема Чакраварти-Ошера [71] и MUSCL-схема с искусственным сжатием MUSCL-TVD3-ACM [126]) на задаче о распаде разрыва. Начальные условия:

$$\rho = 1; v = 0; P = 1.0 \text{ при } x < 0,$$

$$\rho = 1; v = 0; P = 0.1 \text{ при } x > 0.$$

Описанная выше гибридная схема HYBRID2, схема TVD2 Хартена и схема Чакраварти-Ошера дают очень близкие результаты. Это связано с тем, что во всех них используются процедуры, похожие на ограничитель *MinMod*. Как и было отмечено раньше, использование ограничителя *SuperBee* в схеме Роу делает разрывы более обостренными, но допускает нефизические явления (немонотонности) на волне сжатия. Наилучшие результаты (из представленных здесь схем) дает схема MUSCL-TVD3-ACM, в которой используется MUSCL-подход в применении к схеме Чакраварти-Ошера с ограничителем *MinMod* и алгоритм искусственного сжатия с коэффициентом сжатия  $b=2$ , при этом решение остается монотонным. При использовании той

же схемы с  $b=4$  на волне разрежения возникает нефизический скачок, связанный с подменой волны разрежения ударной волной.

## ГЛАВА 5 ШИРОКОДИАПАЗОННЫЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Уравнение состояния (УРС) является фундаментальной характеристикой вещества, позволяющей применить общий формализм газовой динамики к конкретным веществам, находящимся в твердых, жидких, газообразных и плазменных состояниях [127-132]. Формализм газовой динамики предполагает [127,127], что УРС является «внешним» элементом газодинамики и вводится независимо от уравнений движения [127,131]. УРС рассчитываются теоретически методами статистической физики [127], либо строятся по результатам экспериментов. Полуэмпирические модели УРС объединяют оба этих подхода [131,132], когда вид функциональной зависимости УРС выбирается, исходя из теоретических моделей, а численные коэффициенты в них выбираются на основании экспериментальных данных [129,132].

В данной главе, следуя [127,131,132], рассматриваются современные требования к УРС, теоретические и экспериментальные методы изучения термодинамических свойств веществ, различные аспекты построения широкодиапазонных УРС, а также примеры применения полуэмпирических УРС вещества при моделировании нестационарных гидродинамических явлений. Более подробно с этими вопросами можно ознакомиться в работах [129-140] и в содержащихся там ссылках. Описанный в Главе 5 блок УРС был использован в Главе 7 для численного моделирования высокоскоростного соударения металлических пластин.

При работе над данным разделом диссертации использована следующая публикация автора, в которой, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования: Ломоносов И.В., Фортова С.В., Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. – 2017, том 55, вып. 4, с. 596–626.

### 5.1 Введение

Свойства индивидуальных веществ изменяются в очень широких пределах [127]. Например, если типичный идеальный газ изотермически сжать в 2 раза, давление в нем также изменится в 2 раза, однако, в случае кристалла

такое сжатие увеличит давление в нем на 5-6 порядков. Под уравнением состояния обычно [131,132] понимают функциональную связь между термодинамическими параметрами, которая является фундаментальной характеристикой вещества [127]. Знание УРС позволяет на основании термодинамических законов рассчитывать различные термодинамические процессы [127,127], а совместно с применением общих методов механики сплошных сред - и газодинамические явления [127-132]. УРС замыкает систему уравнений газовой динамики [127,131,139,140] и вводит в процесс расчетов конкретные количественные характеристики моделируемой среды.

Появление новых высокопроизводительных ЭВМ и связанное с этим развитие рассмотренных в Главах 1- 4 эффективных разностных схем расчета нестационарных газодинамических явлений резко повысило требования к УРС вещества [129-132]. Точность и достоверность результатов моделирования в настоящее время определяются не только погрешностями в решении дифференциальных уравнений, выражающих законы сохранения, а не в меньшей мере – погрешностями в УРС рассматриваемой сплошной среды. Поэтому для успешного моделирования необходимо иметь современные широкодиапазонные УРС.

Часто, особенно в англоязычной литературе, под УРС понимают не только соотношения между термодинамическими параметрами состояния, но и всю систему определяющих уравнений механики сплошных сред [131-140]. В этом случае к ним относят модели упругости, пластичности, разрушения, электромагнетизма, теплопроводности, турбулентности, вязкости, нелокальные процессы переноса энергии электронами, ионами, фотонами и многое другое, необходимое для описания движения реальных объектов. Здесь мы будем понимать под УРС зависимости между термодинамическими величинами.

При всей общности и внутренней непротиворечивости формального аппарата механики сплошных сред [127-140], численные расчеты конкретных явлений имеют свою специфику, задающуюся выбранными УРС. При типичном мощном энерговыделении в веществе реализуется достаточно сложный термодинамический сценарий [132,140]. В расчетах реализуются различные области фазовой диаграммы – от холодного кристалла до плотной горячей жидкости, испаренного вещества и ионизованной плазмы. Содержательное моделирование таких процессов требует применения широкодиапазонных УРС [131,132].

В значительном количестве представляющих практический интерес процессов макроскопические параметры вещества меняются достаточно медленно по сравнению со скоростями релаксационных процессов, приводящих к установлению термодинамического равновесия. В таких условиях частицы сплошной среды в каждый момент времени пребывают в состояниях, близких к термодинамически равновесному. При адиабатическом движении [127,127,131] (отсутствие теплообмена) для описания равновесного состояния частиц газа оказывается достаточным задания энтропии или внутренней энергии как функций удельного объема и давления:  $S(V,P)$ ,  $E(V,P)$  [127,131]. В общем неадиабатическом случае [127-132] в уравнение энергии входит температура, которую необходимо также связать с давлением и удельным объемом, например, в виде  $P(V,T)$  [131,132]. Согласно термодинамике [127,131], все функции состояния могут быть получены с помощью одного из термодинамических потенциалов (внутренней энергии, энтальпии, свободной энергии Гельмгольца, потенциала Гиббса и т.п.) [127,127], заданных в виде функций от соответствующих сопряженных переменных [127,131].

Перечислим общие требования [127-132,139] к широкодиапазонным УРС, которые сформулированы в [139,140]. Это:

⇒ широкодиапазонность, т.е. описание с приемлемой точностью термодинамических свойств вещества от холодного сжатого кристалла до горячей плотной жидкости, воспроизведения областей высокотемпературного плавления и испарения, разреженной жидкости и плазмы;

⇒ в пределах каждой фазы УРС должны (вне ударных разрывов) описывать термодинамику гладким образом;

⇒ для каждой фазы должны выполняться условия термодинамической

стабильности вещества [127]: 
$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S \geq \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T \geq 0; \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P \geq \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\rho \geq 0$$

отдельно следует выделять области с аномальным значением критерия Бэте- Вейля:

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_S < 0;$$

⇒ «расширяемость», т.е. возможность коррекции УРС при появлении новой экспериментальной или теоретической информации;

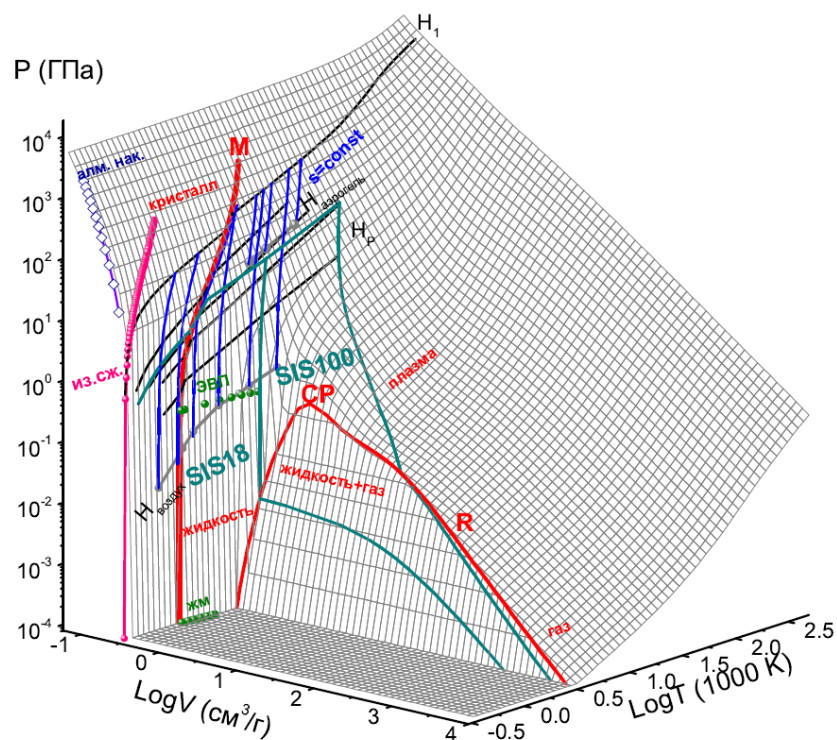


⇒ эффективность при использовании в программах численного моделирования (время расчета УРС должно быть заметно меньше времени газодинамических вычислений на каждом временном шаге);

Выполнение перечисленных требований и построение современных широкодиапазонных УРС осуществляется с помощью различных подходов [127,131,132].

## 5.2. Общий анализ фазовой диаграммы

Типичная фазовая диаграмма металла взята из обзора [132] и представлена на **Фиг.5.1**.



**Фиг.5.1** Обозначения – область плавления;  $R$  – граница двухфазной области жидкость-пар с критической точкой  $CP$ ;  $H_1$  и  $H_2$  – ударные адиабаты кристаллического и пористого алюминия;  $H$  и  $H_1$  – ударные адиабаты воздуха и аэрогеля; ал. нак. – измерения изотермической сжимаемости в алмазных наковальнях; жм – измерения плотности жидкого металла при комнатном давлении; из. сж. – изоэнтропическое сжатие; эвл – опыты по изобарическому расширению алюминиевых проволок, нагретых мощным импульсом тока (электровзрыв проводников);  $S$  – из-энтропы разгрузки;  $SIS18$  и  $SIS100$  – области, достижимые в экспериментах с пучками тяжелых ионов. Показаны агрегатные состояния вещества

Несмотря на значительный прогресс экспериментальной физики высоких давлений и температур [132], современному эксперименту доступны лишь отдельные, часто очень ограниченные, участки фазовой диаграммы Рис. 5.1 [132]. Традиционные теплофизические эксперименты выполнены для большого числа веществ при комнатном давлении в различных агрегатных состояниях и представлены в обширных справочных изданиях, см., например, [131,132].

Основным инструментом изучения твердого тела при высоких давлениях является статическое сжатие исследуемых образцов в алмазных наковальнях [141], позволяющее определять изотермическую зависимость  $p(V, T = const)$  и тип кристаллической решетки. Потолок статических давлений сегодня составляет до 400 ГПа для классических наковален [141] и достигает 660 ГПа в случае использования нано-алмазов [142]. Применение т.н. «лазерных» алмазных наковален (laser-heated diamond anvil cell) [141], в которых сжатый образец кратковременно нагревается лазерным излучением, позволило реализовать в образцах железа условия, типичные для ядра Земли – до 380 ГПа и 5700 К [143].

В условиях мощного импульсного нагрева (электровзрыва) проводника в атмосфере инертного газа при внешнем давлении  $< 0.1-0.4$  ГПа получены теплофизические данные по проводимости, удельному объему  $V$ , энтальпии  $H$ , температуры  $T$ , удельной внутренней энергии  $E$  и изэнтропической скорости звука  $c_S$  для фазового состояния нагретой расширенной жидкости [132] – область ЭВП на **Фиг.5.1**. Переход к двумерной геометрии при электровзрыве металлических фольг реализует область неидеальной плазмы с развитой ионизацией, характеризующейся высокими значениями удельной внутренней энергии до 50 кДж/г и давлений до 1 ГПа, см. ЭВФ **Фиг.5.1** [132].

Использование мощных ударных волн позволило продвинуться вверх по шкале давлений на многие порядки величин и сделало объектом лабораторных исследований рекордно высокие давления мега-барного и гига-барного диапазона [131,132,144]. Идейной основой этих динамических методов является так называемая «обратная» задача газовой динамики [131], когда измерение газодинамических параметров движения ударных волн и волн расширения Римана позволяет по автомодельным законам сохранения в алгебраическом (ударная волна) [131,132] или интегральном (волна Римана) [131,132] найти калорическое уравнение состояния ударно-сжатого и разогретого вещества  $E = E_c(P, V)$

К настоящему времени с использованием динамических методов [132,144] получены основополагающие данные по ударному сжатию веществ при мегабарных давлениях, см.  $H_1$  на **Фиг.5.1**, представленные в большом числе оригинальных работ и обобщенных в «компендиумах» [131,144-150].

Продвижение в область давлений порядка гигабар связано с использованием ядерной энергии или мощного лазерного излучения [132]. Краткое содержание результатов исследований ударной сжимаемости при экстремальных давлениях, а также вопросов фиксации фазовых превращений при ударном сжатии можно найти в [129,132,139,140]. Отметим, что до сего времени остается непревзойденным рекордный результат советских ученых [150], выполнивших уникальное исследование ударной сжимаемости алюминия до 4-х миллиардов атмосфер и выявивших так называемые «оболочечные» эффекты при сжатии.

Область фазовой диаграммы с большей плотностью относительно ударной адиабаты  $H_1$  соответствует сжатию по квазиизэнтропе. Этот тип сжатия реализуется при сжатии отраженными ударными волнами  $H_2$ ; при многократном ударном сжатии в серии реверберируемых ударных волн (многоступенчатое ударное сжатие); при сжатии магнитным полем или при специальном режиме сжатия профилированным лазерным излучением [132]).

При изучении области фазовой диаграммы вещества с пониженной, относительно  $H_1$  плотностью, значительный прогресс достигнут с применением двух основополагающих идей – ударного сжатия пористого вещества и фиксации состояний в волне адиабатического расширения ударносжатого вещества [131,132].

В настоящее время в условиях статических и динамических экспериментов получено большое количество опытных данных в различных, часто ограниченных и изолированных частях фазовой диаграммы – до девяти порядков по давлению, шести - по температуре и плотности. Спектр фазовых состояний включает сжатый кристалл, область ионизации давлением плазмы, горячую жидкость, неидеальную плазму и испарение с критической точкой, для описания которых применяют разнообразные теоретические подходы [127,131,132,144].

Говоря о возможностях современной теории, надо отметить, что современные теоретические модели не позволяют осуществить надежное описание термодинамических свойств сжатого и разогретого вещества во всей обширной области фазовой диаграммы, необходимой для задач численного моделирования [131,132]. Основная трудность состоит в отсутствии малых

параметров для использования аппарата теории возмущений, а также в трудностях построения реалистического псевдопотенциала межчастичного взаимодействия для применения современных безпараметрических методов молекулярной динамики и Монте-Карло. Мы не имеем возможности даже кратко коснуться значительного числа изоцированных теоретических моделей, учитывающих квантовые и корреляционные эффекты в сильном коллективном и межчастичном взаимодействии [132]. Интересующихся этой трудной и увлекательной областью мы отсылаем к обзору [132] и цитируемым там оригинальным работам.

В теории, как и в эксперименте, мы можем рассчитывать лишь на теоретическое описание отдельных и часто изолированных участков фазовой диаграммы вещества (**Фиг.5.1**).

Характеризуя комплекс современных экспериментальных данных и теоретических методов для области высоких давлений и температур, следует признать наличие, как минимум, двух серьезных проблем [131,132]. Во-первых, экспериментальные данные, полученные различными методами, как правило, не перекрываются между собой на фазовой диаграмме и не являются термодинамически полными. Во-вторых, теоретические методы далеко «не всемогущи», и в рамках одной методики нет возможности произвести расчет всей фазовой диаграммы от холодного кристалла до разогретой жидкости и плазмы [131,132].

Для обобщения результатов экспериментов и теоретических расчетов необходимо термодинамически полные УРС, применимые в широком диапазоне давлений, плотностей и температур, описывающие различные агрегатные состояния вещества и имеющие правильную высокоэнергетическую асимптотику к моделям идеальной плазмы и к квазиклассической модели Томаса-Ферми при высоких температурах и больших давлениях [127,131,132,139,140].

### **5.3. Модели широкодиапазонных УРС**

Широкодиапазонные УРС обычно задаются в полуэмпирическом виде [129-132,140]. Такие УРС и строятся в виде модельных термодинамически полных потенциалов, соответствующих тем или иным современным теоретическим моделям [129-132]. Численные же коэффициенты в этих потенциалах подбираются для конкретного вещества, исходя из доступного набора экспериментальных данных. Например, это плотность при нормальных

условиях, энергия сублимации, характеристики плавления и испарения, скорость звука и т.п. Ряд коэффициентов в этих УРС подбираются из условий наилучшего описания массива доступных статистических и ударно- волновых экспериментальных данных [129-132].

В случае металлов свободная энергии обычно представляется в виде суммы «упругой» компоненты  $E_c(V)$  при  $T=0$  К и «тепловых» вкладов атомов  $F_a(V,T)$  и электронов  $F_e(V,T)$

$$F(V,T) = E_c(V) + F_a(V,T) + F_e(V,T). \quad (5.1)$$

Слагаемые в (5.1) записываются различными способами [129-132].

### 5.3.1. Квазигармоническая модель

В основе современных полуэмпирических УРС лежит так называемая «квазигармоническая» модель твердого тела [127]. Для кристалла, состоящего из  $3N$  гармонических осцилляторов с частотами колебаний  $\omega_i$ , легко получить выражения тепловых вкладов энергии и давления [127,131]:

$$E_a(V,T) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{\hbar \omega_i}{\exp(\hbar \omega_i / kT) - 1}, \quad (5.2)$$

$$p_a(V,T) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{g_i \hbar \omega_i}{V \exp(\hbar \omega_i / kT) - 1}, \quad (5.3)$$

где  $g_i = - \frac{d \ln w_i}{d \ln V}$ .

Далее определяется свободная энергия в виде суммы

$$F_a(V,T) = kT \sum_{i=1}^{3N} \ln \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega_i}{kT}\right) \right], \quad (5.4)$$

В рамках модели Дебая [127-132] спектр малых колебаний  $Z(\omega)$  задается в акустическом приближении:

$$Z(\omega) = \begin{cases} \frac{\omega^2}{2\pi} \left( \frac{1}{c_1^3} + \frac{2}{c_t^3} \right), & \omega \leq \omega_D \\ 0, & \omega > \omega_D \end{cases} \quad (5.5)$$

где  $c_1$  и  $c_t$  продольная и поперечная скорости звука, а нормировка на количество мод колебаний определяет дебаевскую частоту колебаний  $\omega_D$ :

$$V \int_0^{\omega_D} Z(\omega) d\omega = 3N \quad (5.6)$$

Тогда с учетом (5.5) и (5.6) выражение (5.4) записывается в виде

$$F_a(V, T) = RT \left( 3 \ln \left\{ 1 - \exp \left[ -\frac{\theta(V)}{T} \right] \right\} - D \left[ \frac{\theta(V)}{T} \right] \right), \quad (5.7)$$

где  $R = kN$ ,  $\theta = k\omega_D/k$  и

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{t^3 dt}{\exp t - 1}, \quad (5.8)$$

формулы (5.5) и (5.6), соответственно, принимают вид

$$E_a(V, T) = 3RTD \left[ \frac{\theta_D(V)}{T} \right], \quad (5.9)$$

$$p_a(V, T) = \frac{\gamma(V)}{V} 3RTD \left[ \frac{\theta_D(V)}{T} \right]. \quad (5.10)$$

Отметим, что дебаевская функция  $D(q_D/T)$  обеспечивает корректное описание асимптотического поведения теплоемкости в случае низких (кубическая зависимость) и высоких температур (закон Дюлонга-Пти). В (5.10)  $g = -d \ln q_D / d \ln V$  – зависящий только объема коэффициент Грюнайзена.

Термодинамические свойства твердого тела при невысоких температурах без учета электронного возбуждения описываются квазигармонической моделью (5.5) – (5.13) в простом виде:

$$p(V, E) = p_c(V) + \frac{\gamma(V)}{V} [E - E_c(V)], \quad (5.11)$$

известном как калорическое УРС Ми-Грюнайзена [129-132].

$$\text{В (11) } p_c = -dE_c(V) / dV,$$

а «холодная» энергия  $E_c(V) = E_0(V) + (9/8)\theta_D(V)$  – сумма энергии  $E_0$  при  $T = 0$  К и энергии «нулевых» колебаний атомов [127].

В рамках квазигармонической модели (5.3)-(5.7) теперь необходимо определить упругую энергию  $E_c$  и дебаевскую температуру  $\theta_D(V)$ . Наиболее естественный способ [127,132] заключается в использовании экспериментальной ударной адиабаты  $P_H(V)$  и какой-либо аппроксимационной зависимости для коэффициента Грюнайзена. Полагая  $\gamma/V = \text{const}$  [132] нетрудно получить для давления на ударной адиабате

[127,130,132,138]  $p_H(V) = -E_c' + \frac{\gamma_0}{V_0}[E_H(V) - E_c]$  и  $\theta_D(V) = \theta_{D0} \exp\left[\gamma_0\left(1 - \frac{V}{V_0}\right)\right]$  – уравнения для холодной кривой и решение для дебаевской температуры.

Альтернативный способ построения УРС [130,132] заключается в задании «холодной»  $P_C(V, T=0K)$  кривой в известном из теории виде и в использовании либо аппроксимационных зависимостей  $g(V)$ , либо обобщенной формулы Ващенко-Зубарева [130-132,139,140], связывающей коэффициент Грюнайзена и «холодную» кривую:

$$\gamma(V) = \frac{t-2}{3} - \frac{V}{2} \frac{(p_c V^{2t/3})_{VV}''}{(p_c V^{2t/3})_{V'}}, \quad (5.12)$$

Где индекс «с» относится к кривой «холодного» сжатия, а значения параметра  $t=0,1,2$  соответствуют приближениям Слэтера-Ландау, Дугдейла-Макдональда и теории свободного объема [127-132].

В качестве «холодных» кривых в (5.12) используются теоретические и аппроксимационные зависимости – потенциалы.

Так, потенциал Мурнагана [129,130,132] имеет вид:  $p_c(V) = \frac{B_{0c}}{B_p} [\sigma_c^{B_{0c}'} - 1]$ ,

где  $V_{0c}$  – удельный объем при  $p_c = 0$  и  $T = 0$  К,  $S_c = V_{0c}/V$  – степень сжатия,  $B_{0c} = B_c = -V dp_c / dV$  при  $V = V_{0c}$ ,  $B_{0c}' = dB / dp_c$  при  $V = V_{0c}$ . В этом случае (5.11) записывается в

алгебраическом виде [130]:

$$p(V, E) = \frac{B_{0c}}{n} \left[ \sigma_c^n \left( 1 - \frac{\gamma_0}{n-1} \right) - \gamma_0 - 1 \right] + \gamma_0 \left[ \frac{E}{V} + \frac{B_{0c} \sigma_c}{n-1} \right], \quad n = B_{0c}',$$

удобном для газодинамических расчетов при невысоких давлениях ( $P \leq 1$  Мбар) [132].

Более сложные потенциалы следуют из более развитых теоретических моделей [127,129-132,139,140]. В этих случаях на практике применяются потенциалы, построенные для описания более высоких давлений, такие как

$$\text{потенциалы Берча: } p_c(V) = \frac{3}{2} B_{0c} (\sigma_c^{7/3} - \sigma_c^{5/3}) \left( 1 - \frac{3}{4} (4 - B_{0c}') (\sigma_c^{2/3} - 1) \right),$$

$$\text{Морзе: } p_c(V) = \frac{3B_{0c}}{B_{0c}' - 1} \sigma_c^{2/3} \left\{ \exp\left[2(B_{0c}' - 1)(1 - \sigma_c^{-1/3})\right] - \exp\left[(B_{0c}' - 1)(1 - \sigma_c^{-1/3})\right] \right\};$$

$$\text{Борна–Майера: } p_c(V) = \frac{3B_{0c}}{Q-2} \sigma_c^{2/3} \left\{ \exp\left[Q(1-\sigma_c^{-1/3})\right] - \sigma_c^{2/3} \right\},$$

$$Q = \frac{1}{2} (3(B_{0c}' - 1) + \sqrt{(3B_{0c}' - 7)^2 + 8}),$$

$$\text{Розе } p_c(V) = 3B_{0c} (1 - \sigma_c^{-1/3}) \sigma_c^{2/3} \exp\left\{ \frac{3}{2} (B_{0c}' - 1) [1 - \sigma_c^{-1/3}] \right\}.$$

Отметим также вариант задания «холодной» кривой в виде разложения в ряд по степеням обратного межатомного расстояния,  $r_a^{-1} \sim S_c^{1/3}$ , ([129-132] и содержащиеся там ссылки) :

$$p_c(V) = \sum_{i=1}^N a_i \sigma_c^{1+i/3},$$

где для нахождения коэффициентов  $a_i$  используются условия  $p_c(V_{0c}) = 0$ ,  $B_c(V_{0c}) = B_{0c}$ ,  $E_c(V \rightarrow \infty) - E_c(V_{0c}) = E_{sub}$  (энергия сублимации) и коэффициент Грюнайзена (12)  $\gamma(V_{0c}) = \gamma_0$ .

Требование согласия кривой «холодного» сжатия с результатами квантово-статистических расчетов (теория Гомеса-Ферми) для «холодного» давления и его производной дает еще два условия на  $P_c(V)$  [129-132,139,140]. Это позволяет проводить описание до высоких 100-кратных степеней сжатия.

Изложенные в этом разделе модели относятся к относительно невысоким температурам твердого тела, когда атомы кристаллической решетки совершают малые квазигармонические колебания. С ростом температуры растут амплитуды тепловых колебаний атомов, которые становятся сравнимыми с межатомным расстоянием в решетке. Колебания становятся ангармоничными, что в конце концов приводит к плавлению [127] кристалла. Кроме того, с ростом температуры возрастает вклад в термодинамику электронов проводимости [127,131,132].

### 5.3.2. Температурные возбуждения

Для описания области более высоких температур необходимо учитывать ангармонизм тепловых колебаний ионов и термическое возбуждение электронной подсистемы. В [131,132], выполнен учет ангармонизма путем высокотемпературного предельного перехода к идеальному газу атомов или ионов за счет дополнительного слагаемого в (1):



$$F_{aa}(V, T) = \frac{3}{2} RT \ln(1 + z),$$

где  $z = lRT / c_c^2$  - отношение тепловой части давления к упругой, а  $l$  - подгоночный высокотемпературный параметр, определяемый из условия описания данных по ударному сжатию пористого вещества. Тогда нетрудно получить выражение для свободной энергии:

$$F_a(V, T) = \frac{3}{2} RT \ln \frac{\theta^2(V)(1+z)}{T^2},$$

в явном виде содержащее переход от конденсированного ( $z \gg 0$ ) к идеальноегазовому ( $z \rightarrow \infty$ ) состоянию. Существуют и иные термодинамические модели, учитывающие эффекты ангармонизма тепловых колебаний атомов и описывающие аналогичный высокотемпературный переход, см. [132,138-140]. Следует отметить использование в полуэмпирических моделях результатов молекулярно-динамических и Монте-Карловских расчетов жидкости и плазмы, аппроксимирующих теплоемкость

$$C_v = \frac{3}{2} RT \left( 1 + \frac{1}{1 + 0,1T / T_m} \right),$$

и также содержащих требуемую высокотемпературную асимптотику, см. [132].

Учет плавления также необходим для корректной интерпретации результатов ударноволновых экспериментов и, в особенности, расчета температуры при решении газодинамических задач с теплопроводностью [139,140].

Приведем в качестве примера описание плавления согласно [151]. В этой работе кривая плавления рассчитывается на основании критерия Линдемманна [127]

$$T_m / (\omega_D^2 V_m^{2/3}) = const$$

с использованием усредненной величины энтропии плавления  $\Delta S_m = 1,15R$ . Теплоемкость жидкой фазы задается аппроксимационной формулой

$$C_{VL} = C_{VS} - \frac{3}{2} R \frac{\alpha \tau}{\alpha + \tau},$$

где  $\tau = T / T_m$ ,  $T_m$  - температура плавления при плотности, соответствующей заданным значениям температуры и давления,  $\alpha = 0,1 = const$ . Интегрирование

теплоемкости в области смеси фаз «твердое тело – жидкость» со скачком энтропии  $\Delta S_m$  приводит к связи внутренней энергии жидкой фазы  $E_l$  и твердой  $E_s$  в виде

$$E_l(V, T) = E_s(V, T) + RT_m \left\{ \frac{\Delta S_m}{R} - \frac{3\alpha}{4} + \frac{3}{2} \tau \left[ \frac{\ln(1 + \alpha\tau)}{\alpha\tau} - 1 \right] \right\}.$$

Наряду с плавлением, важным является описание полуэмпирическими УРС двухфазной области «жидкость – пар» с критической точкой. Классическим примером служат УРС типа Ван-дер-Ваальса [127,129,132,137,139,140], которые учитывают отталкивание в области сжатия и содержат притяжение в области разрежения. Рассмотрение жидкостных потенциалов в моделях УРС приводится в обзоре [132].

При высоких температурах УРС необходимо учитывать вклад термически возбужденных электронов. Если, согласно (9), удельная тепловая энергия  $E_s(V, T)$  линейно зависит от температуры, то вклад электронной компоненты описывается в идеальном приближении квадратичной зависимостью [127,127,132,137,139,140]. Строгое рассмотрение электронной подсистемы должно корректно учитывать тонкие детали заполнения энергетических зон и топологию поверхности Ферми. Для случая вырожденных электронов проводимости при умеренных температурах можно использовать модель идеального Ферми-газа [127]:

$$E_e(V, T) = \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \nu(E_F), \quad (5.13)$$

$$p_e(V, T) = \frac{\gamma_e E_e}{V}, \quad (5.14)$$

где  $\nu(E_F)$  – плотность электронных состояний на поверхности Ферми,  $\gamma_e = -d \ln \nu / d \ln V$  аналог коэффициента Грюнайзена для электронов. В модели почти свободных электронов  $g_e = 2/3$ .

Полуэмпирические УРС при описании вклада электронной подсистемы используют более упрощенные представления [132,139,140]. Так, численное значение коэффициента электронной теплоемкости  $b_0 \sim n(E_F)$  берется из данных измерений теплоемкости при низких криогенных температурах, а электронный коэффициент Грюнайзена принимается равным 0.5 согласно теории Томаса-Ферми [127,132,139,140]. Тогда вклад электронов

проводимости в свободную энергию принимает максимально простой вид [132,139,140]

$$F_e(V,T) = \frac{1}{2} \beta_0 T^2 \sigma^{-1/2}.$$

Следует отметить, что данная упрощенная зависимость применима для случая больших сжатий. Типичные значения электронного коэффициента Грюнайзена для металлов при  $T = 0$  К находятся в диапазоне 1 – 3, Томас-Фермиевская асимптотика 0.5 для алюминия реализуется при  $T \sim 3 \times 10^4$  К [132], а увеличение температуры до  $T \sim E_F$  (порядка  $10^5$  К для металлов) приводит к снятию вырождения, и при высоких температурах необходимо применять точные формулы для идеального электронного газа [127].

Более сложные аппроксимационные зависимости содержат дополнительные подгоночные параметры и обеспечивают корректные асимптотики в областях низкой и высокой температуры. Так отмеченное в обзоре [132] выражение для электронной компоненты

$$E_e(V,T) = \frac{b^2}{\beta} \ln \left( \frac{\beta T}{b} \right),$$

содержит подгоночные выражения  $\beta = \beta_0 e^{-\gamma}$ , которое при низкой температуре ( $T = b / b$ ) приводит к формуле для вырожденного электронного газа. Подгоночный параметр  $b$  обеспечивает согласие с результатами расчета по модели Томаса–Ферми при конечных температурах. Похожая аппроксимация

$$E_e(V,T) = \frac{\beta T^2}{2} \frac{T_F}{T_F + T \sigma^{-\gamma_e}}$$

применяется при описании электронной компоненты свободной энергии в конденсированной и газовой фазах [152].

Разработаны и более сложные аппроксимационные зависимости, удовлетворяющие предельным асимптотикам для свободного электронного газа. В плазменной области они описывают эффекты первой ионизации и поведение полностью ионизованного металла, переход металл – диэлектрик, характерные особенности коэффициента электронной теплоемкости и пр., см. [132].

В [132,137,139,140] также описаны более изощренные способы учета электронной подсистемы.

Для диэлектриков учет термического возбуждения электронов в зону проводимости при увеличении температуры осуществляется с помощью задания числа свободных электронов, которое зависит от плотности и температуры:  $N_e \sim T^{3/2} \exp(-DE/2kT)$ , где  $DE(V)$  – энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости. Зависимость  $DE(V)$  либо задается модельным образом, либо вычисляется теоретически, и к выражению для диэлектриков (5.4) помимо вклада свободных электронов, добавляется выражение, учитывающее их термическое возбуждение.

### 5.3.3. Табличные и аппроксимационные УРС

При проведении газодинамических расчетов прямое использование широкодиапазонных УРС приводит к значительным затратам машинного времени, см. [132,139,140], и поэтому на практике применяются табличные, сплайновые или аппроксимационных уравнения состояния [129-132,139,140]. В рамках такого подхода используются теоретические методы расчета локальных областей фазовой совместно с полуэмпирическими моделями [132,139,140].

В ранних версиях американской библиотеки SESAME для меди алюминия построены табличные УРС [146] в чрезвычайно широком диапазоне плотностей и температур ( $10^{-3} < \rho < 10^3$ ,  $T < 10^8$  К) на основании расчетов по рафинированным теоретическим моделям твердого тела, жидкости и плазмы в областях их применимости. Были так же использованы модели мягких сфер [132] для жидкого состояния, полуэмпирическая модель конденсированной фазы с учетом плавления, модель Томаса-Ферми при высоких сжатиях и температурах, теория Саха для описания ионизации и ряд иных теорий. Различные области энергетической поверхности  $F=F(V,T)$  сшивались гладким образом, что в принципе позволяет учесть появляющиеся новые более точные опытные или теоретические результаты. Однако, потенциальные поверхности, рассчитанные по разным теоретическим моделям, зачастую оказываются рассогласованными [132], что проявляется в виде аномалий - термодинамической несогласованности, немонотонностей, артефактам разрывов в производных. Наличие скачков и отрицательных значений производных потенциалов, скоростей звука и теплоемкостей затрудняет проведение качественных численных расчетов.

Использование для генерации таблиц широкодиапазонных полуэмпирических моделей УРС, заданной полным термодинамическим потенциалом [127], свободно от указанных недостатков. Такие УРС [132,139] имеют достаточно сложную структуру и большое (до 50-ти) число коэффициентов, что позволяет последовательно учитывать вклады электронной компоненты, атомов решетки и упругой компоненты  $P_c(V)$  путем сшивки потенциалов и аппроксимации зонных квантово механических расчетов при высоких давлениях. По данному принципу построено современное многофазное УРС алюминия [153], использующие первопринципные расчеты методом функционала плотности и квантовой молекулярной динамики в области твердого тела и жидкости для определения коэффициентов в аппроксимирующих свободную энергию формулах.

Калорическое УРС в форме Ми-Грюнайзена (5.11) часто используется в газодинамических расчетах, когда можно не учитывать фазовые превращения. Кроме того, существует большое количество конструкционных материалов, имеющих сложный состав и структуру (композиты, полимеры, различные изоляционные материалы и гетерогенные покрытия, для которых чисто теоретический расчет встречает серьезные трудности или вообще не возможен). Обобщение УРС (5.11) выполнено [139,140] для значительных энергий и пониженных плотностей в виде

$$p(V, E) = p_c(V) + \frac{\Gamma(V, E)}{V} [E - E_c(V)],$$

$$\Gamma(V, E) = \gamma_i + \frac{\gamma_c(V) - \gamma_i}{1 + \sigma_c^{-2/3} (E - E_c(V)) / E_a}.$$

Здесь  $\Gamma(V, E)$  – зависящий от удельного объема и внутренней энергии коэффициент Грюнайзена. Параметр  $\gamma_c(V)$  соответствует случаю малых тепловых энергий, а  $\gamma_i$  соответствует разогретому веществу. Энергия ангармонизма  $E_a$  определяют тепловую энергию перехода от одного предельного случая к другому и находится из данных ударноволновых экспериментов при высоких давлениях [135]. Подробное описание модели УРС, его модификаций и результатов расчетов свойств различных классов материалов приводится в оригинальных работах и обзорах [129,132,137,139,140].

Аппроксимации энергетических поверхностей с помощью сплайнов также используется в газодинамических расчетах [129,137,139,140,154]. Однако, такой способ задания УРС часто приводит к ухудшению точности и нарушениям термодинамической согласованности. Так в работе [154] фазовая диаграмма разбивалась на несколько выбранных областей, в которых при помощи двумерных кубических сплайнов в переменных «плотность–температура» задавались выражения для внутренней энергии и давления. В качестве исходных данных для аппроксимации при построении сплайнового УРС алюминия привлекались результаты расчетов по полуэмпирическому УРС типа Ми-Грюнайзена и методу самосогласованного поля [139,140]. К недостатку уравнений состояния подобного типа следует отнести возникающую вследствие сшивки различных областей термодинамическую несогласованность давления и энергии, т. е. невыполнение термодинамического тождества  $(dE/dV)_T = T(dE/dT)_V - p$  [127]. Ошибка при этом может достигать от 3 до 50%.

Аппроксимационные УРС задают энергетическую поверхность единым аналитическим выражением. Структура таких УРС более сложна, но зато здесь заведомо обеспечивается термодинамическая согласованность получаемых данных [132,137,139,140]. В настоящее время построены различные УРС металлов основной, а также переходных групп и ионных кристаллов, см. [132,140,155].

Разработанные УРС были внедрены в пакеты программ численного моделирования высокоэнергетических процессов различной природы, используемые в ИПХФ РАН, ОИВТ РАН, ИАП РАН и ряде других организаций. Широкодиапазонные полуэмпирические УРС металлов [132] использовались нами в табличном виде. Для монотонного и самосогласованного описания всех производных термодинамических потенциалов с помощью интерполяционных процедур применялись адаптивные, т.е. учитывающие фазовые границы и иные особенности УРС. Калорические УРС (5.14) и их модификации, как указано выше, допускают внедрение в программы численного моделирования в аналитическом виде.

В Главе 7 представлены результаты 1D, 2D и 3D численного моделирования процесса гиперзвукового соударения металлических пластин с использованием полуэмпирических УРС из Главы 5. В натурном эксперименте на поверхности металлической пластины меньшей плотности были обнаружены кольцевые структуры. Путем численного моделирования

данного процесса было показано, что данные структуры появляются в результате развития неустойчивости Рэля-Тейлора. Процессы формирования кратеров и деформации границы металлических пластин были рассмотрены с учетом различных уравнений состояния вещества. Предложены численные модели процесса высокоскоростного соударения металлических пластин с учетом двухкомпонентного уравнения состояния вещества и сложными граничными условиями, что позволило достаточно точно воспроизвести натуральный эксперимент.

В [132] приведены результаты газодинамических расчетов высокоскоростного пробивания ударниками разной геометрии металлических экранов. В [151,153] получены рентгенограммы гиперзвукового удара. Эти данные дают возможность определить размеры и форму облака разлета материала ударника и экрана. Величина интенсивности засветки позволяет сделать оценки распределения плотности вещества в области течения. Экспериментальная информация служила для сравнения с результатами численных расчетов и верификации моделей свойств в соударяющихся металлах [132].

## ГЛАВА 6 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ТЕЧЕНИЙ В СДВИГОВЫХ СЛОЯХ

### 6.1 Введение

Пространственные вихревые течения – сложные нелинейные явления, которые, несмотря на большое количество теоретических, полуэмпирических и численных исследований, все еще далеки от полного понимания [1,156-164]. Это в полной мере относится к процессам, связывающим зарождение вихрей и динамику их развития до перехода к стадии развитого вихревого течения.

Настоящая глава посвящена численному анализу начальной стадии вихревых течений, возникающих через гидродинамические неустойчивости, образование вихрей и их взаимодействие [81,82,164-167,79]. Основополагающими работами в этом направлении являются труды лорда Кельвина [156], Рейнольдса [157], Л.Ф. Ричардсона [158], А.Н. Колмогорова и А.М. Обухова [159,160], О.М. Белоцерковского [161-164], С.М. Белоцерковского [168,169] и др. Благодаря данным работам были созданы модели, ставшие в теории турбулентности общепринятыми: «вихревая теория Кельвина», «энергетический каскад Ричардсона-Колмогорова», «устойчивость Рэлея», «метод крупных частиц О.М. Белоцерковского», «метод дискретных вихрей С.М. Белоцерковского» [156-164,168,169] и ряд других значительных моделей. Сегодня эти классические исследования являются важным этапом современного понимания и количественного описания многих практически важных вихревых режимов в различных объектах природы и техники.

Вместе с тем, благодаря стремительному развитию вычислительной техники, в последние годы все большее внимание уделяется анализу природы турбулентности посредством прямого численного моделирования. В 1976 году академик О.М. Белоцерковский [161] указал на возможность моделирования свободной развитой турбулентности на основе системы уравнений Эйлера. Наиболее последовательно предлагаемый подход изложен в [162-164], где численно исследуются свободные вихревые течения и обосновывается определяющая роль крупных вихрей в структурной турбулентности. Настоящая глава посвящена развитию данного подхода, в определенной мере сфокусированного на топологии и динамике развития крупных вихрей на основе системы уравнений Эйлера.



При работе над данным разделом диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования:

- Белоцерковский О.М., Фортова С.В., Макропараметры пространственных течений в свободной сдвиговой турбулентности // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2010, том 50, № 6, с. 1-14.
- Белоцерковский О.М., Фортова С.В., Исследование спектральных характеристик однородного турбулентного потока // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2012, том 52, № 2, с. 1-8.
- Белоцерковский О.М., Фортова С.В., Исследование каскадного механизма развития турбулентности в свободно- сдвиговом течении // Доклады Академии наук. – 2012, том 443, № 1, с. 44-47.
- Fortova S.V., Investigation of spectrum characteristics of the vortex cascades in shear flow // Physica Scripta. – 2013, № 014049.
- Фортова С.В., Численное моделирование трехмерного течения Колмогорова для сдвигового слоя // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2013, том 53, № 3, с. 433–441.
- Фортова С.В., Вихревой каскад неустойчивостей и переход к турбулентности // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2014, том. 54, № 3, с. 536-544.
- Фортова С.В., Сравнительный анализ формирования вихревых каскадов в различных турбулентных задачах // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2015, том 55, № 2, с. 302-309.

За рамками нашего исследования остаются вопросы, связанные с пограничными слоями, низкими числами Рейнольдса, влиянием вязкостных эффектов и стенок. В данной главе мы будем исследовать модель зарождения вихревых структур в свободном сдвиговом течении [161-164]. Обсуждение применимости используемого нами приближения читатель может найти в обширной литературе (см. [1,156-164]) и содержащихся там ссылок. Отметим основные положения. Развитые вихревые движения начинаются с конечных масштабов, определяемых градиентами скоростей в потоке [161-164]. Рассматривая начальную стадию с крупными структурами, принимается, что молекулярная вязкость слабо влияет на развитие крупномасштабных структур

[161-164]. Такой подход обосновывается в большом числе публикаций [1,4,5,6,162] и формирует следующую модель развития вихревого течения [6, 162,164]. Крупные структуры могут возникнуть в случае, если инерционные члены в уравнениях преобладают над напряжениями, связанными с вязкостью. В этом случае силы, возникающие из поля давления, и динамические силы, связанные с полем скоростей, формируют вихревые структуры. Развитие вихревого течения происходит путем дробления крупных структур и генерации различных интервалов энергетического спектра. Большой интерес при этом представляет изучение условий возникновения и динамики развития вихревого течения [161-167].

Рассматриваемая модель содержит следующие этапы [162-167]: в свободном сдвиговом течении рождаются крупные вихри с размером порядка ширины слоя смешения. Далее, взаимодействие крупных вихрей с потоком рождает более мелкомасштабную часть спектра, который впоследствии и заполняет инерционную часть. Спектр неустойчивости определяется при этом физическим взаимодействием потока и крупного вихря, а развитие течения становится детерминированным физическим явлением. При этом в соответствии с классической теорией А.Н. Колмогорова [159] на долю молекулярной вязкости приходится описание высокочастотной части спектра турбулентности и процесса перехода кинетической энергии турбулентности в тепло.

Ввиду чрезвычайной сложности и нелинейности рассматриваемых явлений, адекватным инструментом их изучения с учетом возможностей современной вычислительной техники является численное моделирование, выполняемого путем изучения невязких и вязких течений [10,12,164]. Большое количество работ, посвященных двумерному численному моделированию неустойчивостей, позволяют достаточно полно интерпретировать натурный эксперимент [164,170,171]. Однако, они не объясняют многих особенностей течения. Проведенные исследования для двумерных свободно сдвиговых течений подтвердили факт образования устойчивых во времени крупных структур [167]. При переходе от расчета двумерных течений к расчету пространственных течений была обнаружена потеря устойчивости крупных вихревых структур и переход течения в развитое вихревое [79,81,82,165-167]. Таким образом, пространственные течения могут сопровождаться гидродинамическими эффектами (потеря устойчивости течения), которые в задачах меньшей размерности не проявляются.

Эффективное численное моделирование указанных гидродинамических проблем напрямую связано как с разработкой современных численных методик, так и возможностями доступной вычислительной техники. Преимуществом развития современной вычислительной техники является возможность производить ресурсоемкие масштабные численные эксперименты, используя даже персональные компьютеры. Описанный в Главе 4 пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** позволяет исследователю достаточно быстро воспользоваться широким спектром уже созданных в вычислительной математике структурных модулей (численными методами, граничными и начальными условиями, различными уравнениями состояния вещества и т.д.) и осуществить численное моделирование гидродинамической задачи на доступных вычислительных средствах-персональных компьютерах.

В данной главе для численного моделирования течений, возникающих в сдвиговых слоях, применяется пакет прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**. Для расчета формирования и эволюции крупномасштабных образований проведена серия двумерных и пространственных вычислительных экспериментов [161-167]. В качестве математической модели использовалась модель сжимаемого невязкого газа, для расчетов применялись численные методики, описанные в пакете (см. Главы 2-4).

С учетом сделанных замечаний, ниже приводятся результаты численного моделирования явления возникновения и развития вихревого каскада неустойчивости в зависимости от различных параметров течения, начальных данных, при отсутствии или наличии воздействия внешней силы.

## 6.2. Математическая модель

В качестве математической модели используется сжимаемый невязкий газ. Для построения численных схем применяется система уравнений гиперболического типа (уравнения Эйлера), которая записана в дивергентной форме в декартовых координатах [4,164]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho^s)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho^s \mathbf{V}) &= 0, \\
\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \mathbf{V}) &= -\frac{\partial P}{\partial x}, \\
\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \mathbf{V}) &= -\frac{\partial P}{\partial y}, \\
\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w \mathbf{V}) &= -\frac{\partial P}{\partial z} - \rho g, \\
\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \operatorname{div}((\rho E + P) \mathbf{V}) &= -\rho g w,
\end{aligned} \tag{6.1}$$

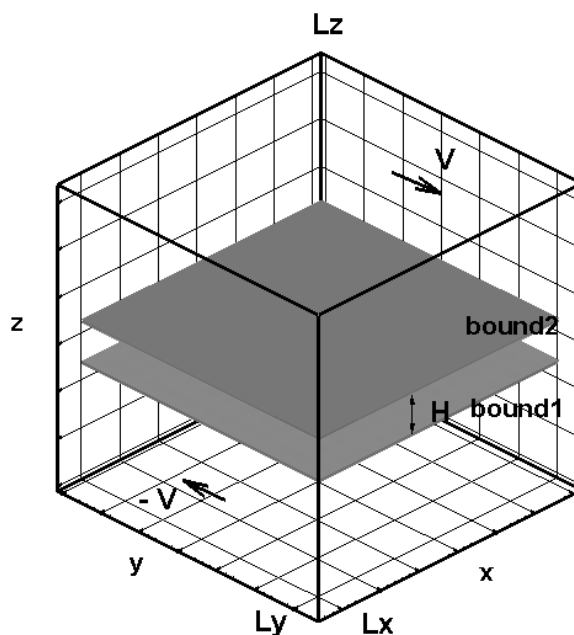
где  $\rho^s$  – плотность различных компонент,  $\rho = \sum \rho^s$  – суммарная плотность газа,  $\mathbf{V} = (u, v, w)$  – скорость течения,  $E$  – полная энергия,  $\epsilon$  – внутренняя энергия,  $P$  – давление,  $g$  – ускорение силы тяжести. Система замыкается уравнением состояния совершенного газа  $P = (\gamma - 1)\rho\epsilon$ .

Для учета силы тяжести правая часть уравнений содержит дополнительные члены, учитывающие добавку к импульсу и общей энергии. Для проведения расчетов применялась гибридная конечно-разностная схема с положительным оператором [164], подробно описанная в Главе 3 диссертации. Применяемые расчетные сетки содержали до 8 млн. узлов, что допускает использование современных персональных компьютеров.

### 6.3. Численное моделирование вихревого каскада

В данной главе рассматривается начальная стадия возникновения турбулентности в сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды. Сдвиговое течение формируется путем наличия в течении конечной в поперечном сечении области с ненулевым градиентом скорости и высотой слоя смешения  $H$ . Численно исследуется эволюция структуры данного сдвигового течения при различных граничных и начальных условиях.

Расчетная область представляет собой трехмерный параллелепипед в прямоугольной системе координат XYZ (Фиг.6.1) со следующими размерами:  $X : 0 \leq x \leq L_x; Y : 0 \leq y \leq L_y; Z : 0 \leq z \leq L_z$ . На верхней и нижней плоскостях параллелограмма использовались граничные условия прилипания, на боковых поверхностях – условия периодичности.



*Фиг.6.1 Расчетная область и основные параметры течения*

Скорость потока в начальный момент времени  $V_0 = -5$  м/с снизу слоя смешения,  $V_0 = 5$  м/с сверху слоя смешения. Для инициализации процесса зарождения крупной вихревой структуры и моделирования развития неустойчивости в сдвиговом течении в качестве начальных условий внутри слоя смешения использовались различные возмущения компонент скорости.

Начальные условия в слое смешения задавались следующим образом.

- Случайные возмущения скорости.

Скорость  $U$  вдоль направления  $X$  равна нулю;

Скорость  $V$  вдоль направления  $Y$  (постоянный градиент скорости  $V$ , профиль скорости линейный):

$$\begin{aligned}
V &= V_0, 0 \leq z \leq bound1, \\
V &= -V_0, bound2 \leq z \leq L_z, \\
V &= 2V_0(z - \pi), bound1 < z < bound2; \\
bound1 &= \pi - 0.5, bound2 = \pi + 0.5;
\end{aligned}$$

Скорость  $W$  вдоль направления  $Z$  имеет слабое случайное возмущение внутри слоя смешения  $bound1 \leq z \leq bound2$  (от 1% до 20% от  $V_0$ );

- Детерминированные возмущения скорости.

Одномодовое возмущение скорости:

$$\begin{aligned}
V &= V_0, 0 \leq z \leq bound1, \\
V &= -V_0, bound2 \leq z \leq L_z, \\
V &= 2V_0(z - \pi), bound1 < z < bound2; \\
bound1 &= \pi - 0.5, bound2 = \pi + 0.5; \\
U &= 0,2 * \sin(2\pi * y) * \cos(\pi * z), \\
W &= 0,2 * \sin(2\pi * y) * \cos(\pi * z).
\end{aligned}$$

Многомодовое возмущение скорости:

$$\begin{aligned}
V &= V_0, 0 \leq z \leq bound1, \\
V &= -V_0, bound2 \leq z \leq L_z, \\
V &= 2V_0(z - \pi), bound1 < z < bound2; \\
bound1 &= \pi - 0.5, bound2 = \pi + 0.5; \\
U &= \sum_i ampl[i] * \sin(a[i]x) * \sin(b[i](x - c[i])), \\
W &= \sum_i ampl[i] * \sin(a[i]y) * \sin(b[i](y - c[i])).
\end{aligned}$$

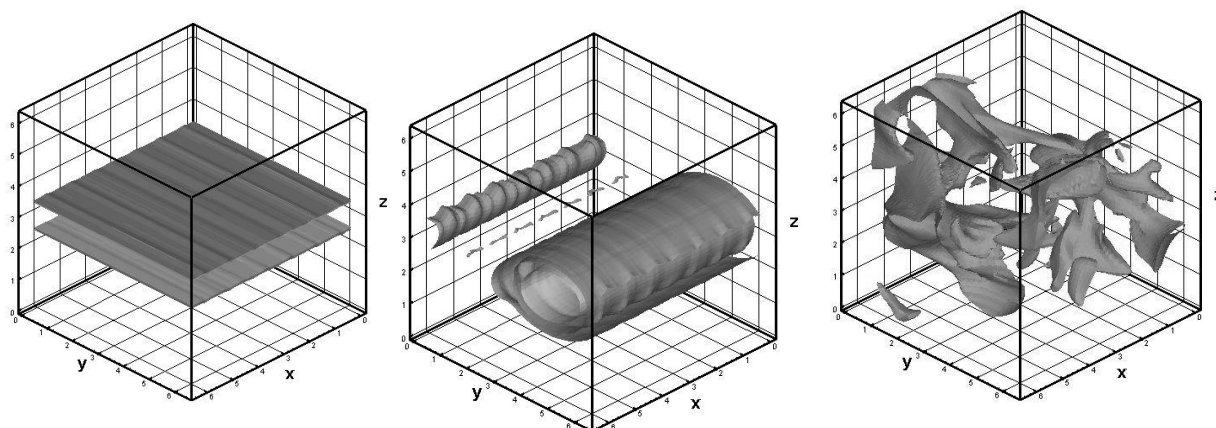
Число мод варьировалось от 1 до 15. Амплитуда возмущения составляла  $ampl[i] = 2/i$ . Частоты возмущений брались в следующем виде  $a[i] = 1/i$   $b[i] = 2i$  со сдвигом  $c[i] = i$ .

Явление вихревого каскада неустойчивостей в сдвиговом слое представляет собой формирование в течении крупной вихревой структуры с последующим ее распадом на более мелкие вихревые образования [1,127,162,163].

Рассматривая различные режимы течения в сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды, которые приводят к развитию неустойчивостей, отметим многообразие факторов, влияющих на данное развитие: выбор начального распределения параметров в слое возмущения; геометрические параметры

области течения; влияние постоянной действующей силы (задача Колмогорова); влияние величины сдвиговой скорости и т.п. Каждый из этих факторов оказывает существенное влияние на формирование вихревых каскадов и приводит к различным сценариям развития неустойчивостей, которые исследованы в последующих разделах [79,81,82,165-167].

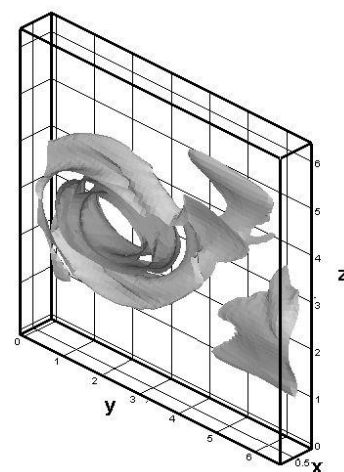
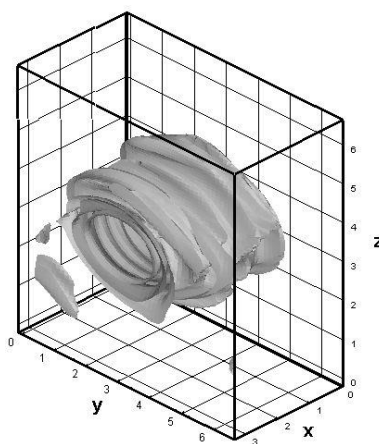
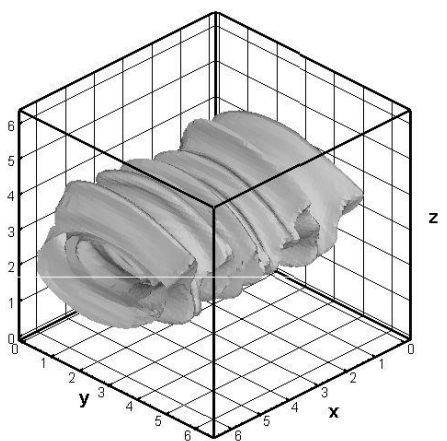
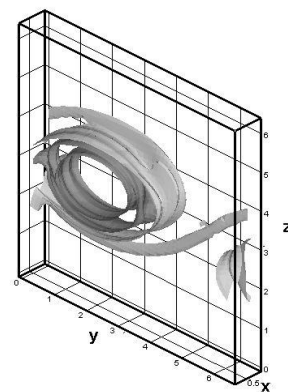
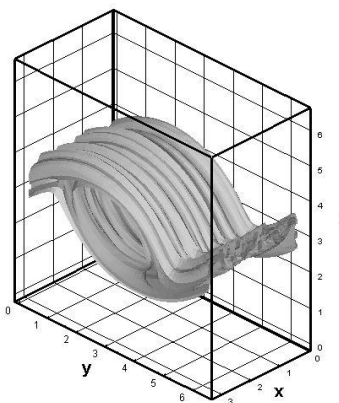
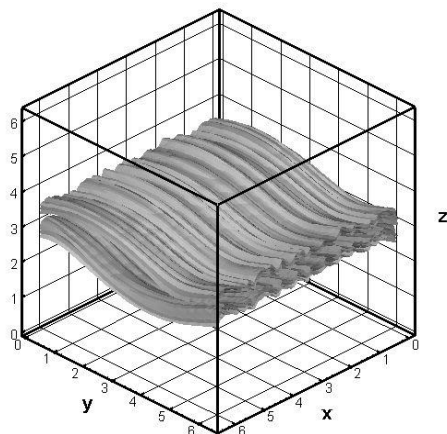
Численные эксперименты, проведенные с применением пакета прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**, показали [79,81,82,165-167], что вначале при определенных граничных и начальных условиях в сдвиговом слое формируется крупная вихревая структура (см. **Фиг.6.2**). Она представляет собой вторичное течение в форме рулона, плавно обтекаемого внешним потоком [81,82]. Затем на поверхности вихревого рулона начинают появляться неустойчивости в виде вихревых жгутов, формирующиеся из обтекающего внешнего потока. Данные вихревые жгуты приводят к разрушению крупной структуры и возникновению в течении вихрей различных масштабов. Данное явление получило название вихревого каскада неустойчивостей в сдвиговом слое [79,81,82]. Обратим особое внимание на то, что вторичные вихревые жгуты садятся на первичный вихрь в поперечном направлении [81,82]. В расчетах показано, что в случае, если вторичные вихри садятся в продольном направлении, то дробления вихрей не происходит. Данный результат, как нам представляется, получен впервые. Общий вид описанного выше формирования вихревого каскада в сдвиговом слое представлен на **Фиг.6.2**.



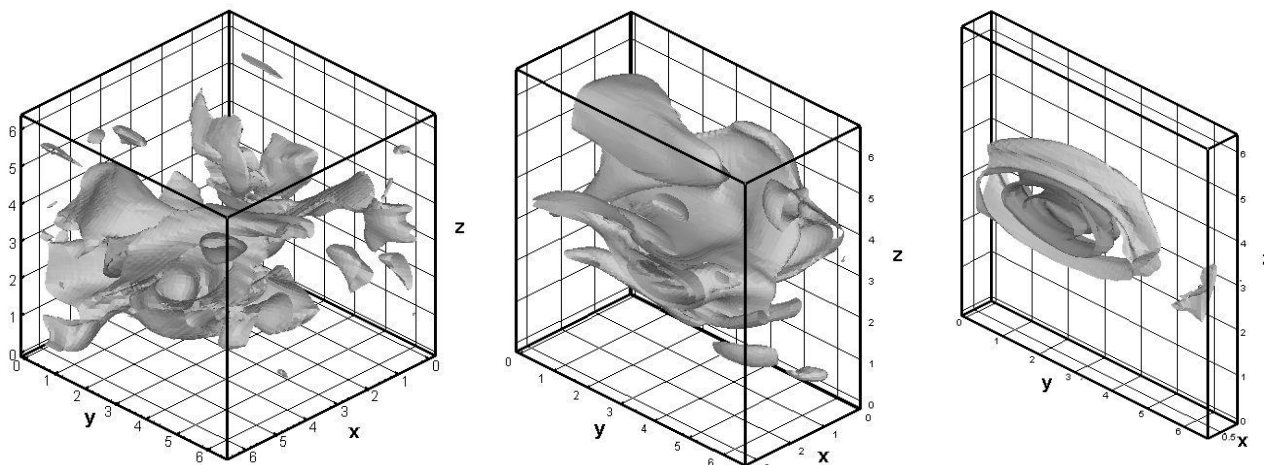
**Фиг.6.2** Формирование вихревого каскада

### 6.3.1. Условия возникновения вихревого каскада

Рассмотрим более подробно формирование вихревого каскада в зависимости от размеров расчетной области при случайном возмущении скорости в слое смешения.





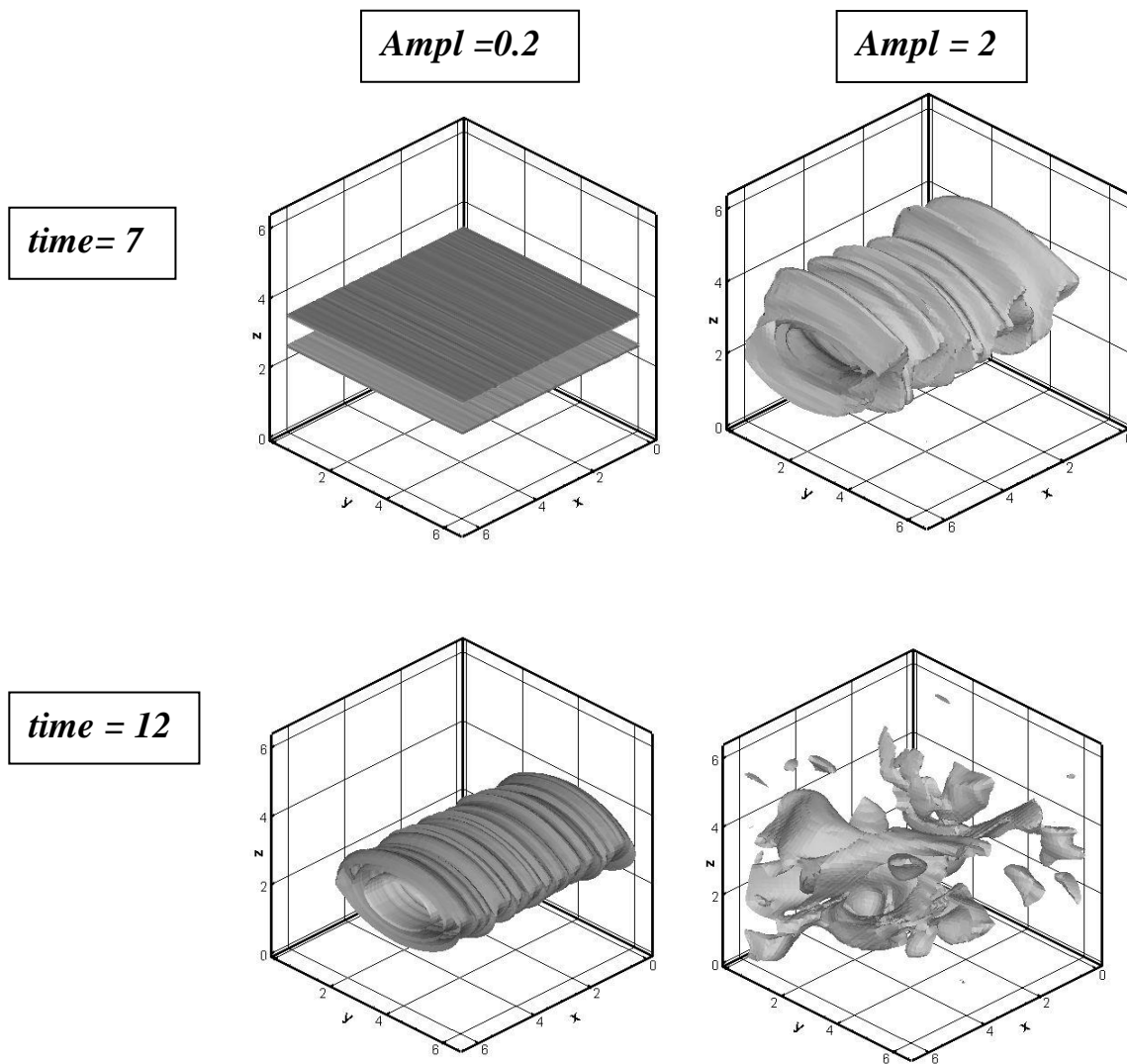


**Фиг.6.3** *Изоповерхности плотности в различные моменты времени - 5,7,12 (сверху вниз). Протяженность сдвигового слоя в направлении X -  $2\pi$ ,  $\pi$ ,  $\pi/4$  (слева направо). Начальное возмущение скорости в слое смешения случайно*

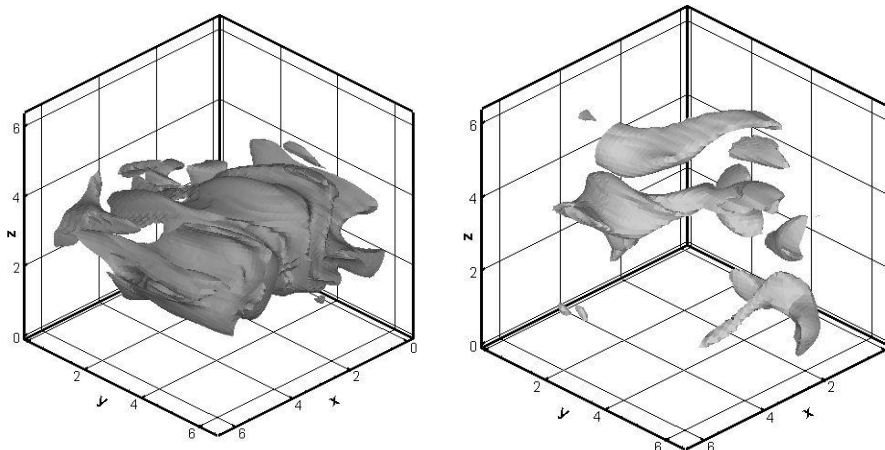
На **Фиг.6.3** показано влияние ширины области (в направлении X) на динамику процесса развития неустойчивостей. В начальный момент времени внутри слоя смешения задавалось высокочастотное случайное возмущение вертикальной компоненты скорости. Размеры области варьировались от  $2\pi$  до  $\pi/4$ . Деформация слоя смешения происходит следующим образом: сначала формируется один крупный вихрь масштабом порядка размера слоя смешения. Устойчивость данной крупной структуры зависит от ширины области в направлении X. Определены критические размеры возникновения вихревого каскада. При размерах области в пределах  $\pi/4 \leq Lx \leq 2\pi$  крупная структура является неустойчивой. В данном случае течение со временем переходит в развитое вихревое через развитие каскада неустойчивостей. При размерах области течения  $0 \leq Lx \leq \pi/4$  крупный вихрь устойчив во времени [81]. Это означает, что в узком канале (в направлении X) сформировавшееся вторичное течение устойчиво, хорошо согласуется с двумерной теорией Бэтчелора [172].

Так же было исследовано влияние амплитуды случайных возмущений скорости в слое смешения. Получено, что увеличение амплитуды возмущений скорости приводит к более быстрому развитию вихревого каскада неустойчивостей по сравнению с меньшей амплитудой возмущения. На **Фиг.6.4** представлено развитие вихревого течения при различных амплитудах

возмущения скорости. При  $ampl = 2$  развитое вихревое течение сформировалось уже к моменту времени  $t = 7$ . Течение с меньшей амплитудой (в 10 раз) в тот же самый момент времени еще только входит в стадию формирования крупной структуры. Фактически, течение с амплитудой  $ampl = 2$  развивается в 2 раза быстрее течения с амплитудой  $ampl = 0.2$ .



*time = 17*



**Фиг.6.4** Изоповерхности плотности в различные моменты времени - 7,12,17 (сверху вниз). Левая колонка соответствует амплитуде возмущения скорости 0.2, правая – 2

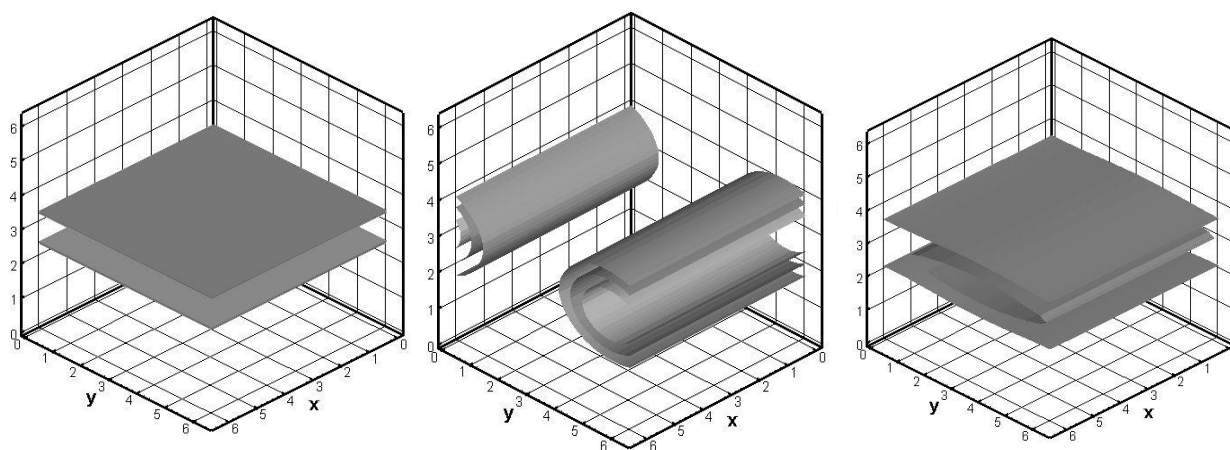
Рассмотрим более подробно формирование вихревого каскада в зависимости от размеров расчетной области в случае детерминированного возмущения скорости в слое смешения.

Для более детального изучения влияния начальных условий на развитие течения будем исследовать вид вертикальной компоненты скорости  $\vec{V}(u, v, w)$ , который приведет к возникновению вихревого каскада. Для этого введем функцию:

$$w = a * \sin \omega y,$$

с помощью которой мы будем исследовать влияние заданных начальных возмущений скорости на течение. Полагая внутри слоя смешения возмущение для вертикальной составляющей компоненты скорости в этом виде, мы пытались смоделировать случайное колебание скорости. Однако, в результате расчетов мы не получили развития каскада вихрей. Течение, сформировавшееся при данных условиях, скорее можно назвать «коллапсом» вихря [81]. Поясним подробнее это явление. Вихревое течение формируется в крупную структуру, которая устойчива во времени. Эта структура представляет собой крупный вихрь, как бы сплюснутый в поперечном направлении. Со временем этот вихрь, сжимаясь в поперечном направлении, становится плоским и исчезает. Течение становится невозмущенным. Данный процесс изображен на **Фиг.6.5**. Отметим, что изменение частоты  $\omega$  и амплитуды  $a$  возмущения скорости влияет лишь на время формирования вихря

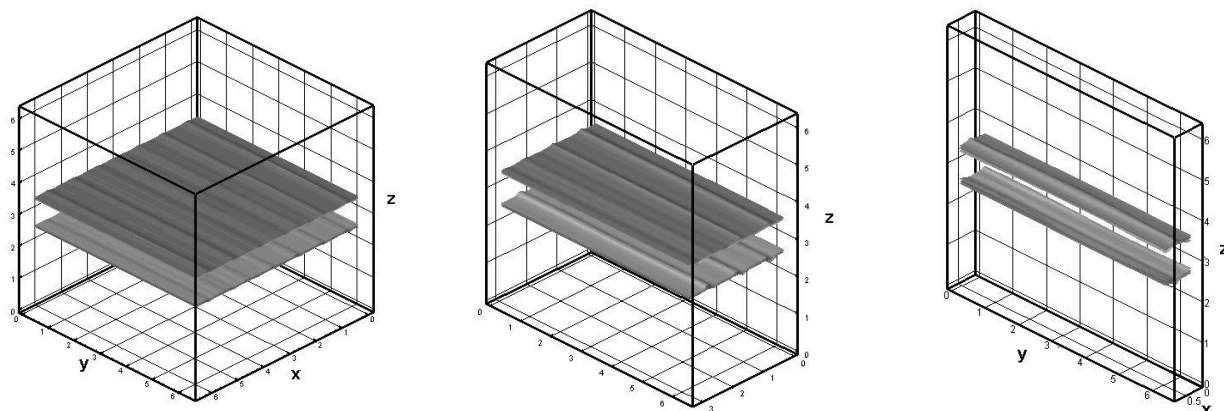
и его исчезновение: чем больше амплитуда и выше частота, тем быстрее происходит процесс «коллапса». Объяснение этого факта, возможно, заключается в следующем. На **Фиг.6.5** видно, что на поверхности сформировавшейся крупной структуры появляется вторичная неустойчивость в виде вихревых жгутов, расположенные в продольном направлении. Это отличается от предыдущего случая, где жгуты возникали на поверхности крупной структуры в поперечном направлении. Видимо, это и является основной причиной «коллапса». Данные соображения приводят к следующему выводу – если вторичная неустойчивость появляется на поверхности крупной структуры в поперечном направлении, то течение переходит в развитое вихревое, если – в продольном, то такого перехода не происходит, а течение остается ламинарным. Возможно, этот факт объясняется тем, что процесс развития и роста неустойчивостей зависит от механизма формирования вихревых жгутов на поверхности крупного вихря. Вихревые жгуты, находясь в зоне деформации структуры большего масштаба, растягиваются и закручиваются под действием закона сохранения момента импульса. Если жгуты расположены на поверхности крупной структуры поперек сдвиговому течению, то возникают силы, способные разрушить вторичное течение и сформировать вихревой каскад неустойчивостей. Подчеркнем, что данный процесс имеет принципиально трехмерную природу.

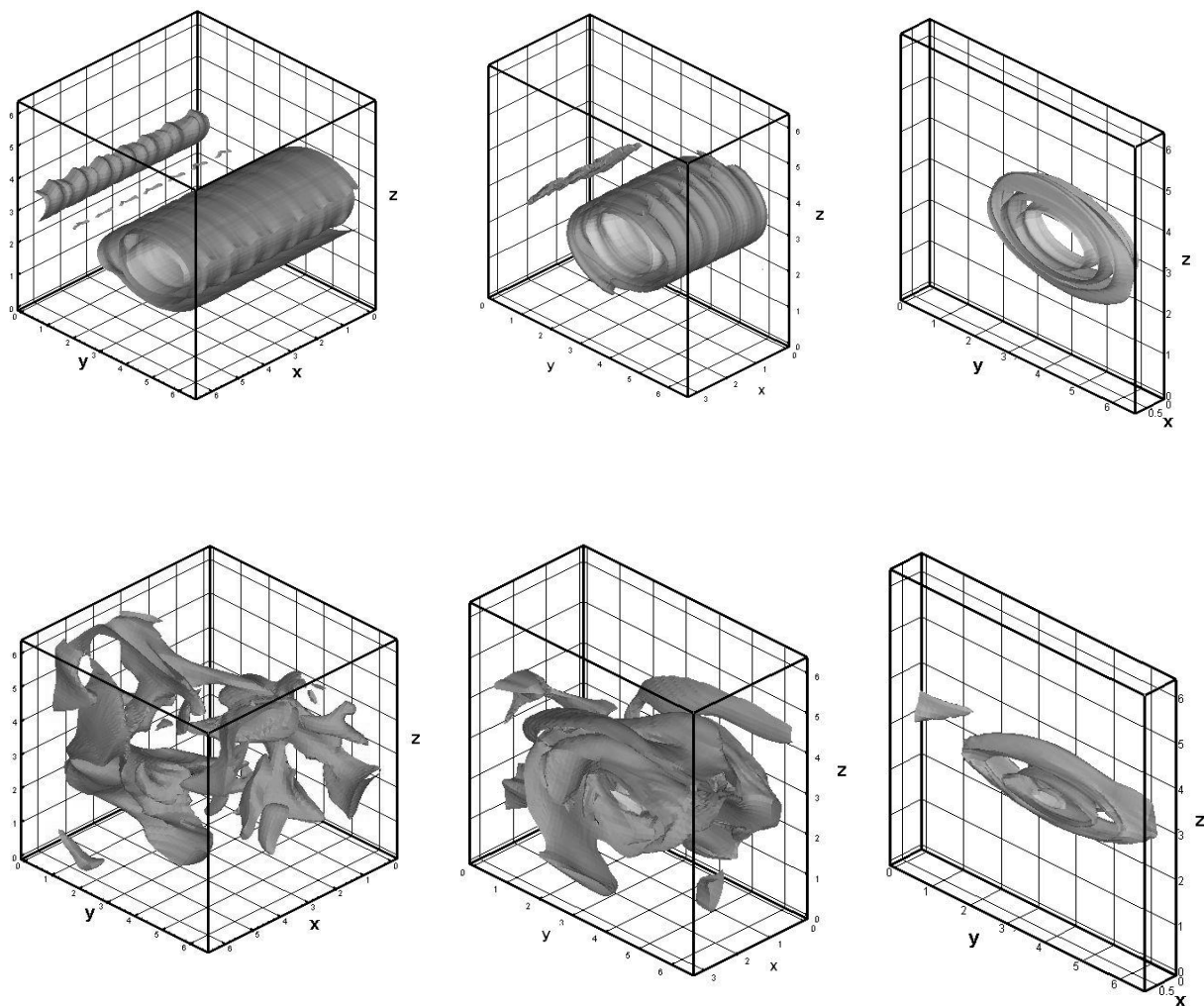


**Фиг.6.5** Процесс формирования «коллапса» вихря (слева направо). Моменты времени 5, 30, 50

Получить вторичную неустойчивость на поверхности крупной структуры в поперечном направлении и приводящую течение к хаотичному, удалось, используя в качестве начальных данных детерминированное возмущение скорости как в вертикальном, так и горизонтальном направлении.

Результат данного исследования для одномодового возмущения скорости представлен на **Фиг.6.6**. Здесь показано возникновение вихревого каскада и его зависимость от размеров расчетной области. Подобно варианту со случайным начальным возмущением вертикальной составляющей скорости, мы получили один крупный вихрь масштабом порядка размера слоя смешения [82]. Устойчивость данной крупной структуры также зависит от ширины области в направлении  $X$ . Критические размеры этой области аналогичны: при  $\pi/4 \leq Lx \leq 2\pi$  наблюдается распад крупного вихря и переход течения в хаотичное через вихревой каскад [79,81,82]. При размерах области  $0 \leq Lx \leq \pi/4$  крупный вихрь устойчив во времени. Аналогичные результаты получены для многомодового возмущения скорости в слое смешения. Количество мод, величина амплитуды, частоты и сдвига существенно не меняют развитую картину течения.





**Фиг.6.6** *Изоповерхности плотности в моменты времени - 5,10,12 (сверху вниз). Размер сдвигового слоя в направлении X -  $2\pi$ ,  $\pi$ ,  $\pi/4$  (слева направо). Начальное возмущение вертикальной и горизонтальной компонент скорости детерминировано*

Резюмируя вышесказанное и переходя к условиям, приводящим к возникновению вихревого каскада неустойчивостей, необходимо отметить:

- Полученные результаты показывают, что наличие в начальный момент времени как случайного возмущения вертикальной составляющей скорости, так и детерминированного возмущения скорости в вертикальном и поперечном направлении приводит к возникновению вихревого каскада неустойчивостей и переходу течения в развитое вихревое при амплитуде возмущения, большей 5 процентов от скорости основного потока. В этих случаях вторичная неустойчивость появляется на поверхности крупной структуры в виде вихревых жгутов в поперечном направлении, что по-

видимому является определяющим фактором возникновения вихревого каскада.

- При наличии детерминированного возмущения только вертикальной составляющей скорости, вторичное течение сохраняет свою устойчивость в течение определенного промежутка времени с последующем «коллапсом» вихревой структуры. Определяющим фактом при возникновении данного режима течения, на наш взгляд, является то, что вторичная неустойчивость появляется на поверхности вихря в продольном направлении.

- Рост амплитуды возмущения компонент скорости приводит к увеличению скорости развития вихревого течения.

### 6.3.2 Энергетические характеристики вихревого течения

Для описания и анализа развитых вихревых течений, имеющих принципиально стохастический характер, применяются специально вводимые интегральные характеристики [1,156-161]. В данном разделе при изучении вихревой стадии течения кратко рассмотрим лишь некоторые интегральные характеристики, которые в дальнейшем будем использовать при рассмотрении полученных численных результатов.

Для анализа развития вихревого течения применяют спектральный анализ энергетических характеристик, основоположниками которого являются А.Н. Колмогоров [159] и А.М. Обухова [160]. Ими изучены и выведены законы, описывающие локальные свойства однородной и изотропной турбулентности [159,160]. Кратко приведем их основное содержание. При больших числах  $Re$  в однородном турбулентном потоке присутствуют пульсационные движения с широким спектром. В этом процессе основную часть энергии турбулентного потока содержат крупномасштабные пульсации. Мелкомасштабные пульсации так же присутствуют в движении, но содержат меньшую часть всей кинетической энергии потока. Таким образом, от крупномасштабных движений непрерывным потоком идет энергетическая подпитка движений с более мелкими масштабами. В конечном итоге на мелких масштабах (за счет вязкости) происходит диссипация энергии в тепло.

Ожидаемый механизм энергетического обмена был подробно описан в статье А.Н. Колмогорова [159]. Данная модель получила широкое признание, подтверждена большим количеством опытов и теоретических исследований, и к данному моменту стала классической. Согласно [159,160], реализуется следующая схема формирования развитого вихревого движения. При больших

числах  $Re$  турбулентное движение разделяется на три интервала. На интервале энергии, который состоит из формирования крупных структур, генерируется основная часть энергии потока. На инерционном интервале происходит непрерывная передача энергии от крупных вихрей к мелким. И на интервале диссипации через мелкомасштабную турбулентность кинетическая энергия вихрей переходит в тепло [159,160].

Для широкого класса физических процессов при больших числах  $Re$  на энергетическом и инерционном интервалах развитого вихревого движения влияние молекулярной вязкости на общие характеристики потока незначительно [1,25,164]. Поэтому исследование динамики больших вихрей можно проводить на базе моделей идеальной среды, например, уравнений Эйлера [159,164]. В данной части работы основное внимание уделено именно инерционному интервалу, играющему важное значение для всего исследуемого процесса. Отметим основные особенности инерционного интервала [173]: энергия в нем не генерируется и не диссипирует, а непрерывно передается в пространстве волновых чисел от меньших к большим.

Приведем известные оценки для распределения энергии пульсационного движения  $E(k)$  поля скорости для инерционного интервала, выведенные из соображений подобия [164]:

$$E(k) \approx \Theta^{2/3} k^{-5/3}$$

$k$  – волновое число,  $\Theta$  – скорость диссипации энергии на единицу массы. Этот закон получил название «закона  $-5/3$  Колмогорова». Существование инерционного участка доказано экспериментально для различных турбулентных течений. Волновое число, соответствующее точке перехода от инерционного интервала к интервалу диссипации, называется «колмогоровским» масштабом. Для вихревых течений с волновыми числами, меньшими этого масштаба, вязкостью можно пренебречь и вести численный эксперимент на основе модели идеальной среды. В случае течений с большими волновыми числами, сопоставимыми с «колмогоровским» масштабом, вязкость начинает играть существенную роль и влияет на характер взаимодействия мелких вихрей. При современном уровне вычислительной техники возможно проводить высококачественные расчеты на диссипативном участке спектра для течений с характерными числами Рейнольдса порядка 100000.



В данной работе при численном моделировании вихревого движения в сдвиговых слоях особое внимание уделяется построению спектрального распределения кинетической энергии движения поля скоростей, определения инерционного участка спектра и доказательства «закона  $-5/3$  Колмогорова».

В соответствии с классическим подходом, для анализа этого вихревого процесса приведем спектральное описание кинетической энергии. Разлагая кинетическую энергию, приходящаяся на единицу массы, в двумерный интеграл Фурье по ортогональным гармоническим функциям по вертикальной координате  $Z$ , получим:

$$E(x, y, z = const) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} [E^1(k_x, k_y) \cos(k_x x) \cos(k_y y) + E^2(k_x, k_y) \cos(k_x x) \sin(k_y y) + E^3(k_x, k_y) \sin(k_x x) \cos(k_y y) + E^4(k_x, k_y) \sin(k_x x) \sin(k_y y)],$$

где  $E$  – кинетическая энергия на единицу массы жидкости,  $k_x$  и  $k_y$  – проекции волновых векторов вдоль осей  $Ox$  и  $Oy$ ,

соответственно,  $E^i(k_x, k_y)$ , ( $i = 1..4$ ) – коэффициенты Фурье:

$$E^1(k_x, k_y) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} E(x, y, z = const) \cos(k_x x) \cos(k_y y) dx dy,$$

$$E^2(k_x, k_y) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} E(x, y, z = const) \cos(k_x x) \sin(k_y y) dx dy,$$

(6.2)

$$E^3(k_x, k_y) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} E(x, y, z = const) \sin(k_x x) \cos(k_y y) dx dy,$$

$$E^4(k_x, k_y) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} E(x, y, z = const) \sin(k_x x) \sin(k_y y) dx dy.$$

Величина

$$E(k_x, k_y) = \sqrt{[E^1(k_x, k_y)]^2 + [E^2(k_x, k_y)]^2 + [E^3(k_x, k_y)]^2 + [E^4(k_x, k_y)]^2} \quad (6.3)$$

является образом величины  $E(x, y, z = const)$  в пространстве волновых чисел.

Коэффициенты Фурье находятся интегрированием (6.2). Далее, вычисляем (6.3) и получаем величину  $E(k_x^i, k_y^j)$ , зависящую только от

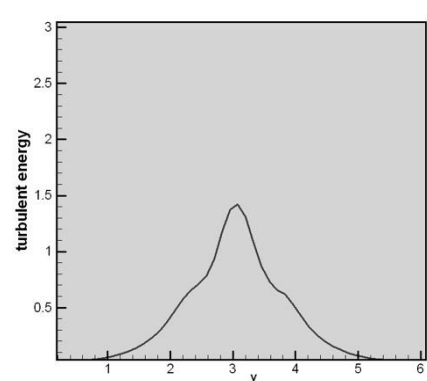
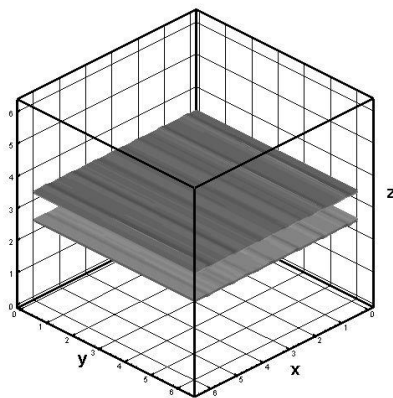
волновых чисел  $k_x^i$  и  $k_y^j$ . Перебирая все  $k_x^i$  и  $k_y^j$  по обоим направлениям, получаем спектр кинетической энергии.

В данной работе спектральное представление кинетической энергии рассматривается в середине области по вертикальной координате.

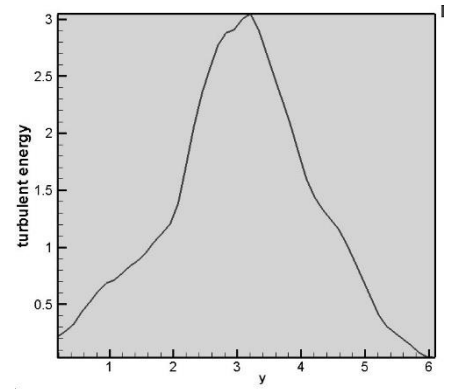
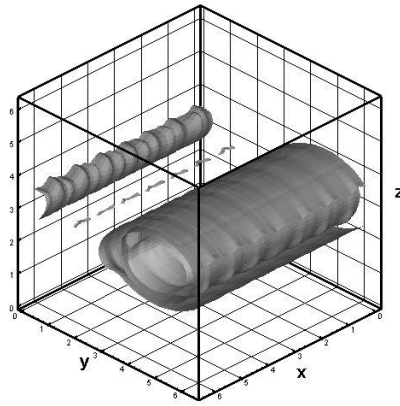
Перейдем к изложению результатов, используя описанные выше характеристики.

На **Фиг.6.7** и **Фиг.6.8** показано распределение и спектр кинетической энергии с выполнением «закона  $-5/3$  Колмогорова» с точностью до 20 процентов. На стадии формирования крупной структуры при  $t=5$  энергия течения концентрируется в центре сдвигового слоя. При  $t=10$ , энергия постепенно возрастает и достигает своего максимума в центре сформировавшейся крупной структуры. Из этого можно сделать вывод о том, что в турбулентном течении крупные вихри не только определяют структуру течения, но и несут его основную энергию [82]. В дальнейшем, при развитии вихревого каскада, энергия распределяется по масштабам каскада. То есть, во время развития вихревого течения энергия постепенно переходит от крупных вихрей к более мелким, и в конечном итоге диссипирует в тепло, что соответствует теории Колмогорова [158,159].

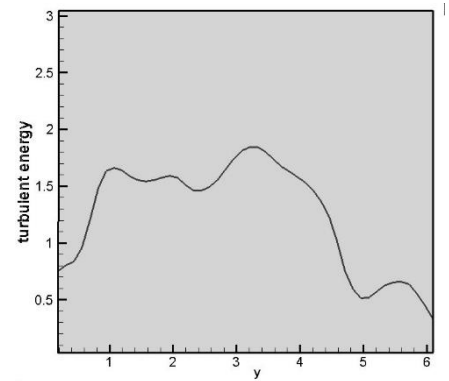
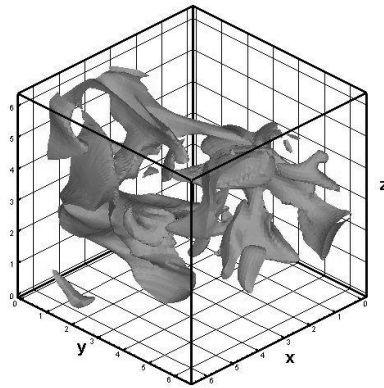
**time = 5**



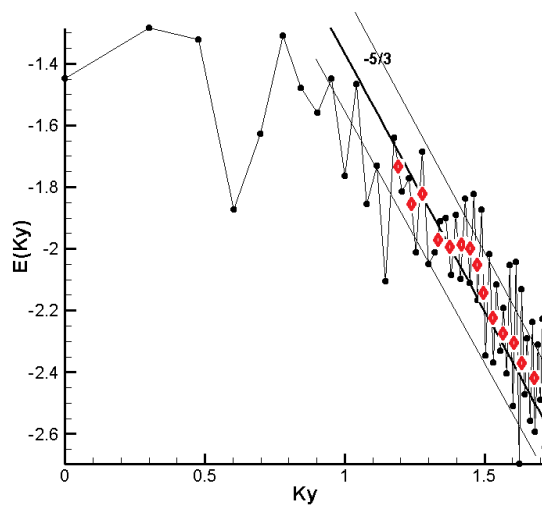
**time = 10**



**time = 15**



**Фиг.6.7** Изоповерхности плотности и распределение кинетической энергии вдоль направления  $Y$

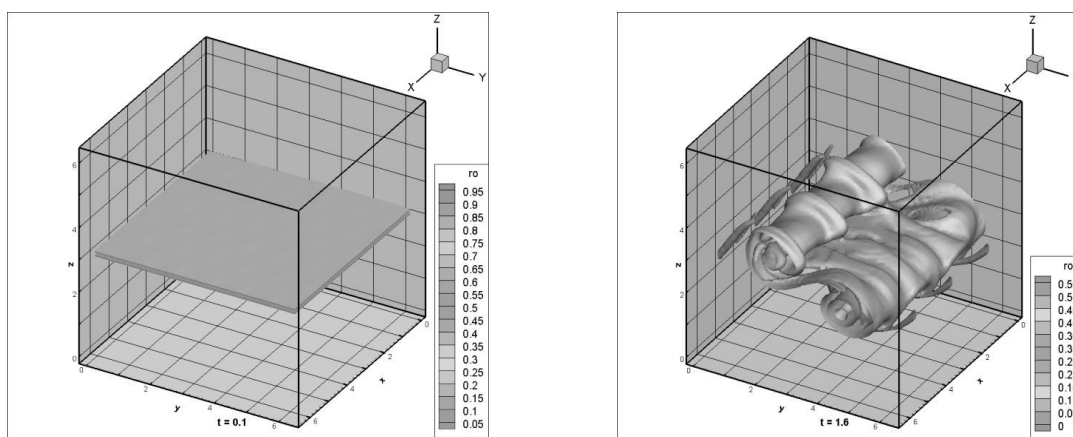


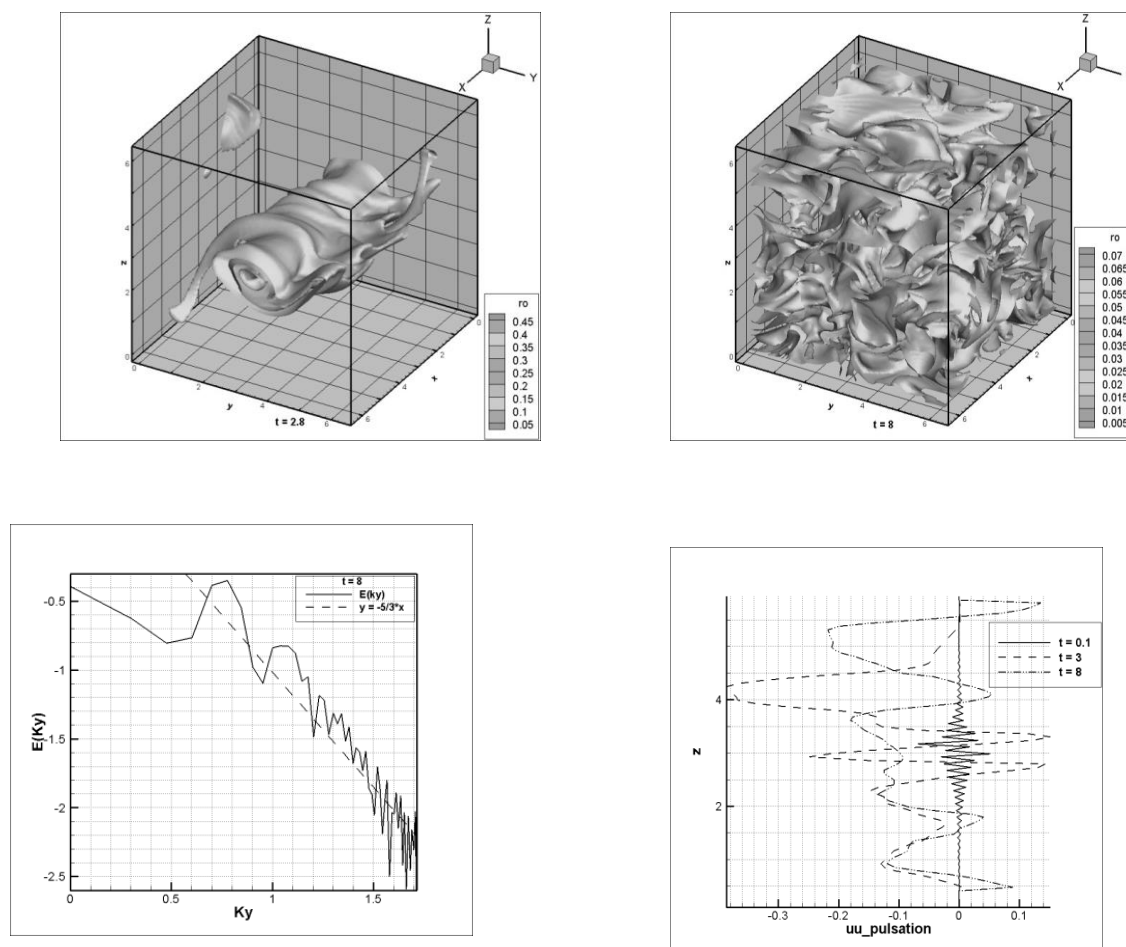
**Фиг.6.8** Спектр кинетической энергии пульсации скорости на развитой стадии вихревого движения в момент времени  $t=28$

### 6.3.3 Влияние параметров течения на структуру вихревого каскада

Анализируя только те режимы течения, в которых наблюдается наличие вихревого каскада, рассмотрим подробно эволюцию структуры сдвигового течения с конечной в поперечном сечении областью постоянного ненулевого градиента скорости с различной высотой слоя смешения  $H$ . В качестве начального возмущения скорости внутри слоя смешения берутся детерминированные возмущения, которые, как было показано выше, приводят к возникновению вихревого каскада. Данная часть работы имеет своей целью показать возможные сценарии перехода к турбулентной стадии течения в сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды.

Начальный этап развития вихревого каскада при высоте слоя возмущения  $H=1$  рассмотрен в предыдущих пунктах и состоит из формирования одной крупной структуры, плавно обтекаемой потоком. В случае малой толщины слоя смешения ( $0.1 < H < 1$ ) наблюдается иная картина формирования вихревого каскада. Крупная структура сначала представляет собой связку из двух вихревых рулонов (см. **Фиг.6.9**). При дальнейшем развитии течения эти рулоны объединяются, и формируется так же одна крупная структура. С течением времени неустойчивости, возникающие на поверхности крупного вихря, его разрушают и формируется вихревой каскад. На **Фиг.6.9** продемонстрировано развитие вихревого каскада, распределение энергии пульсаций по волновым числам и пульсации скорости для высоты слоя смешения  $H=0.1$ .





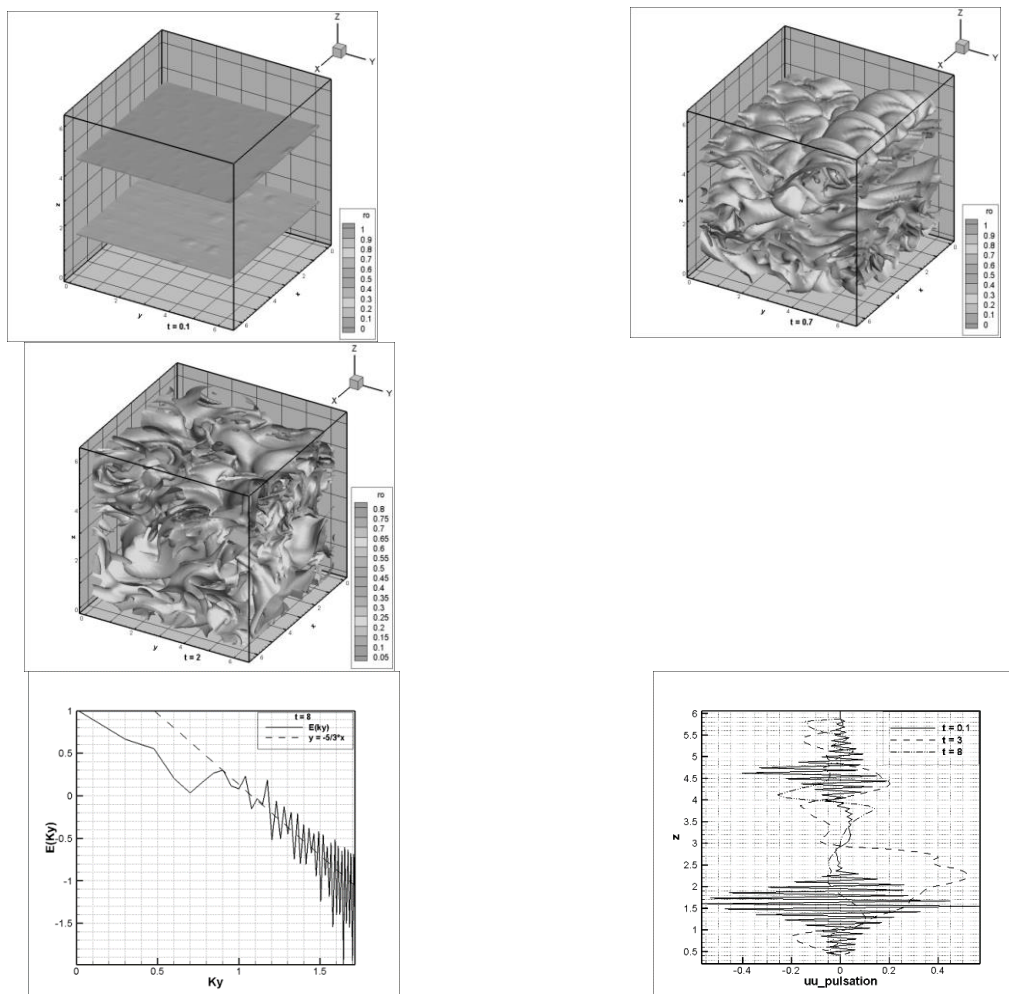
**Фиг.6.9** Вихревой каскад неустойчивостей для сдвигового слоя, спектр кинетической энергии и пульсация скорости при  $H=0.1$

Рассмотрим спектральное представление кинетической энергии в середине области по вертикальной координате и проследим процесс формирования устойчивого участка спектра энергии пульсаций компонент скорости. На **Фиг.6.9** показано распределение энергии пульсаций скорости

$$E = \left( \langle u'^2 \rangle + \langle v'^2 \rangle + \langle w'^2 \rangle \right) / 2$$

по волновым числам продольных пульсаций с наклоном  $-59^\circ = \arctg(-5/3)$ .

Начальный этап развития вихревого каскада неустойчивостей при высоте слоя возмущения  $L$  в пределах  $2 < H < 3$  представляет собой иную картину (см. **Фиг.6.10**). Потеря устойчивости течения происходит, минуя стадию образования крупной структуры. Неустойчивости возникают на границах слоя возмущения и развиваются в вихревой каскад путем прямого обрушения в турбулентность.



**Фиг.6.10** Вихревой каскад неустойчивостей для сдвигового слоя, спектр кинетической энергии и пульсация скорости при  $L=3$

Аналогичное исследование спектральных характеристик течения обнаружили наличие инерционного участка в энергетическом спектре и выполнение «закона  $-5/3$  Колмогорова» (см. **Фиг.6.10**).

На **Фиг.6.10** в частности изображены эволюция пульсации продольной компоненты скорости в зависимости от времени. Можно наблюдать их постепенное развитие вдоль вертикального направления. Предельный режим-пульсация с нулевым средним. Со временем данные пульсации развиваются и колеблются около нулевого значения. Данная эволюция показывает установление турбулентного профиля в течениях при отсутствии вязкости и стенок. Данные результаты хорошо согласуются с экспериментальными исследованиями, проведенными Конт-Белло [174].

Выводы данной части работы следующие:

- В зависимости от высоты слоя смешения в сдвиговом течении развиваются различные сценарии развития вихревых каскадов – при малой высоте слоя переход к турбулентной стадии происходит путем образования связки двух крупных структур, при большой высоте слоя данный процесс развивается без образования крупных структур.
- Вне зависимости от сценария, проведенные расчеты в обобщенном смысле обнаружили наличие инерционного участка в энергетическом спектре и выполнение «закона  $-5/3$  Колмогорова» с точностью до 20 процентов.
- Возникновение турбулентности во всех рассмотренных случаях носит характер сложного трехмерного явления.

### 6.3.4 Влияние постоянно действующей силы на структуру вихревого каскада (задача Колмогорова)

В данной части работы мы проведем исследование влияния постоянного внешнего воздействия на формирование вихревых каскадов в пространственном сдвиговом слое сжимаемой невязкой среды и дадим сравнение с задачей, рассмотренной в разделах 6.3.1-6.3.3 [166]. Основой для данного исследования послужила работа А.Н. Колмогорова и А.М. Обухова [175], где для более глубокого изучения вихревых течений предложено двумерное движение вязкой жидкости, возникающее под действием периодического (по одной из координат) поля внешней силы.

Для численного исследования в данной работе используется модель сжимаемого невязкого газа, описанная в разделе 6.2 настоящей главы, с правой частью. В данном случае меняются только уравнение для плотности импульса вдоль направления X:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho u \mathbf{V}) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho \bullet \text{ampl} \bullet \sin(z), \quad (6.4)$$

и уравнение для плотности полной энергии

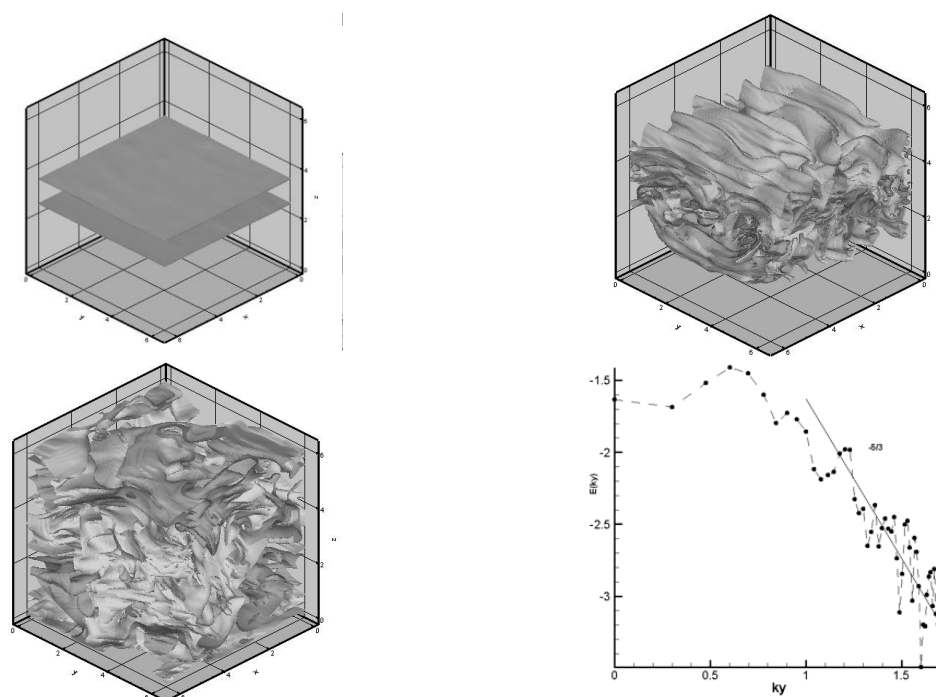
$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \text{div}((\rho E + P) \mathbf{V}) = \rho \bullet u \bullet \text{ampl} \bullet \sin(z) - \rho g w. \quad (6.5)$$

Расчетная область представляет собой трехмерный параллелепипед в прямоугольной системе координат XYZ с размерами  $X: 0 \leq x \leq L_x; Y: 0 \leq y \leq L_y; Z: 0 \leq z \leq L_z, 0 \leq L_x, L_y, L_z \leq 2\pi$ . Начальное возмущение компонент скорости внутри слоя смешения задается детерминированно. В

качестве граничных условий на верхней и нижней границе расчетной области были выбраны условия прилипания, на остальных – условия периодичности. Исследуется формирование и развитие вихревого течения в сдвиговом слое с конечной в поперечном сечении областью постоянного ненулевого градиента скорости с высотой слоя смещения  $H=1$  при наличии постоянной действующей внешней силы.

Для проведения расчетов применялась гибридная конечно-разностная схема с положительным оператором [164], подробно описанная в Главе 3 диссертации. Применяемые расчетные сетки содержали до 8 млн. узлов.

Наличие постоянной внешней силы оказывает заметное влияние на формирование вихревого потока по сравнению с задачей, где внешняя сила отсутствует [81,82,165-167]. В случае отсутствия внешней силы начальный этап развития турбулентности состоял из формирования крупной структуры с последующим распадом на более мелкие структуры. При этом возникало вторичное течение в виде вихревого рулона, плавно обтекаемого потоком. Затем рулон, как крыло, начинал обтекаться следующим вторичным течением из стопки вихревых жгутов, в которые сворачивается обтекающий «ламинарный» поток. В результате образовывался вихревой каскад неустойчивостей. В случае задачи Колмогорова поток формируется по-другому (Фиг.6.11).

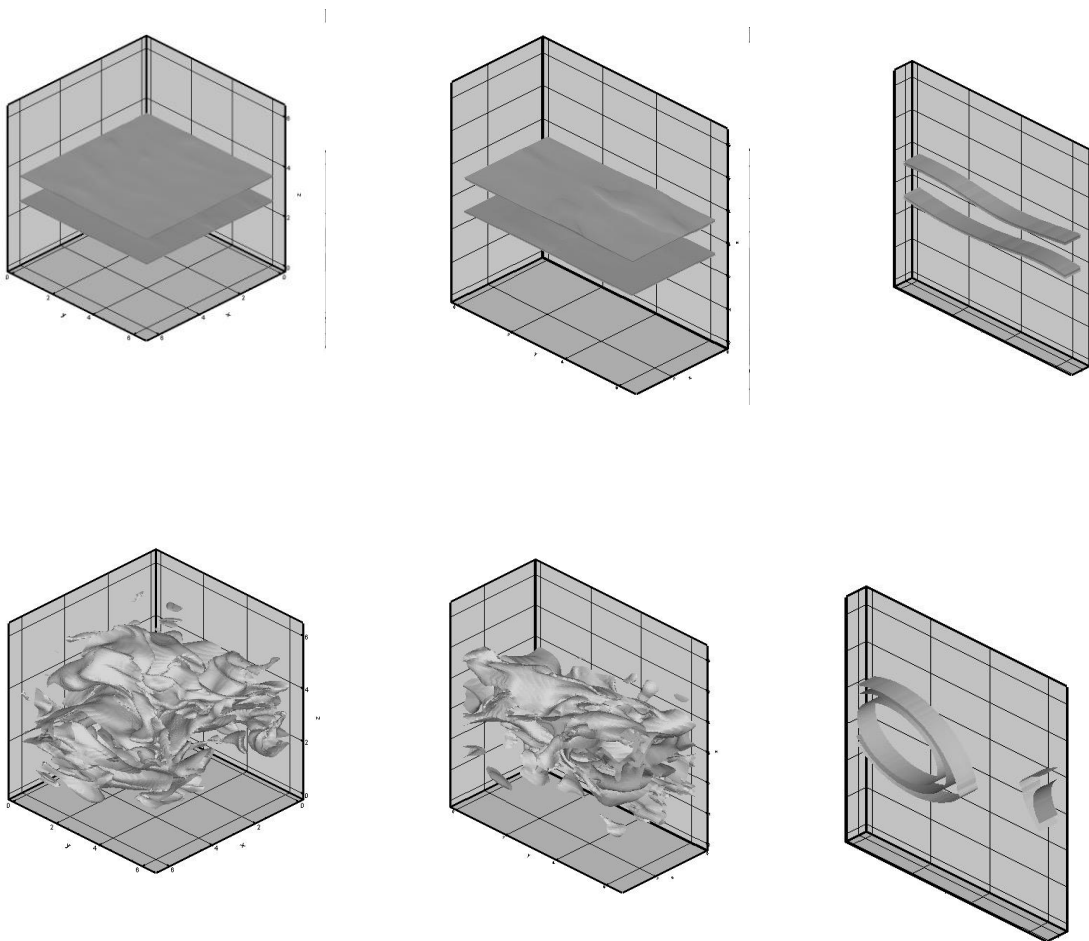


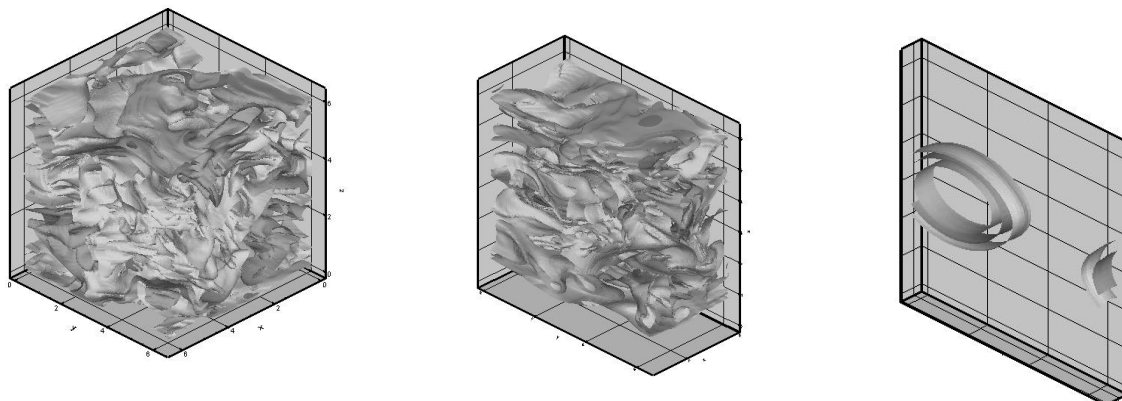
**Фиг.6.11** Вихревой каскад и спектр кинетической энергии для задачи Колмогорова. Моменты времени - 5,7,15



Силы, действующие внутри сдвигового слоя, как бы растягивают его в противоположных направлениях. В результате чего сдвиговой слой принимает вид гребенки, состоящей из нескольких зубцов, которые постепенно увеличиваются в размерах и деформируются. Вторичные неустойчивости, появляющиеся на каждом из зубцов, со временем нарушают эту регулярную структуру, и течение переходит в многомасштабную хаотическую стадию.

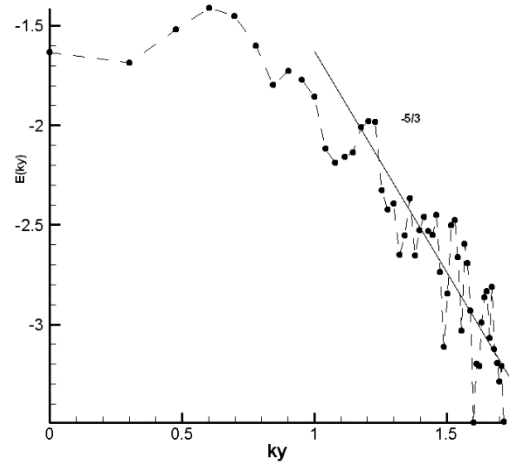
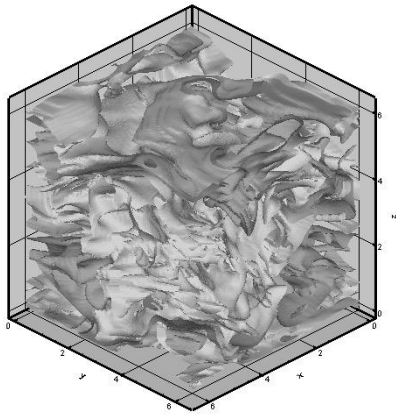
Рассмотрим влияние размеров расчетной области на формирование развитого вихревого течения в задаче Колмогорова. На **Фиг.6.12** дан анализ влияния ширины области в направлении  $X$ . Размеры области варьировались от  $2\pi$  до  $\pi/8$ . При  $\pi/2 \leq Lx \leq 2\pi$  наблюдается развитие вихревого каскада неустойчивостей; при  $0 \leq Lx \leq \pi/2$  образовавшаяся крупная структура устойчива во времени.



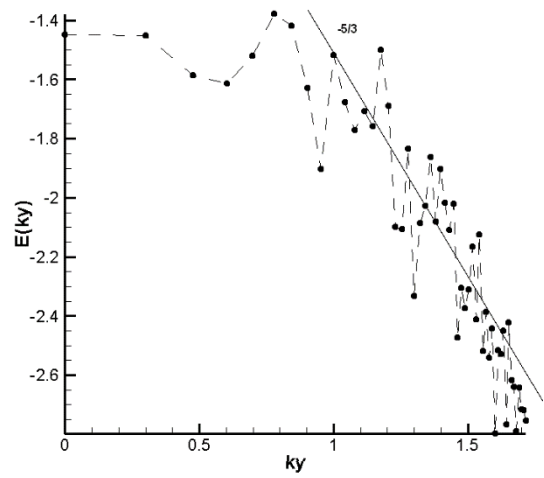
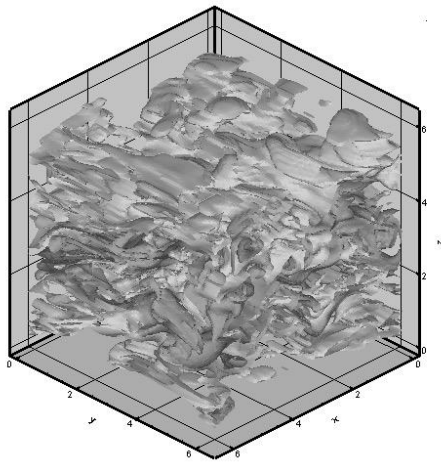


**Фиг.6.12** Изоповерхности плотности в моменты времени - 5,7,12 (сверху вниз). Размеры сдвигового слоя в направлении  $X$  -  $2\pi$ ,  $\pi$ ,  $\pi/8$  (слева направо)

В работе проведено исследование амплитуды внешней силы на формирование вихревого течения. Получено, что при увеличении амплитуды ( $ampl=1$ ,  $ampl=3$ ) вихревое течение формируется быстрее в случае большей амплитуды. На **Фиг.6.13** и **Фиг.6.14** можно наблюдать развитие вихревого течения при различных амплитудах внешней силы: при  $ampl = 3$  вихревое течение к моменту времени  $t = 5$  уже сформировалось, в то время, как течение с амплитудой в 3 раза меньше в тот же самый момент времени находится еще в начальной стадии формирования. Фактически, течение с большей амплитудой полностью перешло в развитую стадию к тому моменту времени, когда течение с меньшей амплитудой только начинает развиваться ( $t = 7$ ). К моменту времени  $t = 15$  оба течения находятся в хаотической стадии. Одним из доказательств этого факта является соблюдение «закона  $-5/3$  Колмогорова».



**Фиг.6.13** Изоповерхности плотности и спектр кинетической энергии для течения с амплитудой воздействия  $a_{mp1} = 1$  в момент времени  $t=15$



**Фиг.6.14** Изоповерхности плотности и спектр кинетической энергии для течения с амплитудой воздействия  $a_{mp1} = 3$  в момент времени  $t=5$

Для продольной составляющей скорости исследовались различные профили:

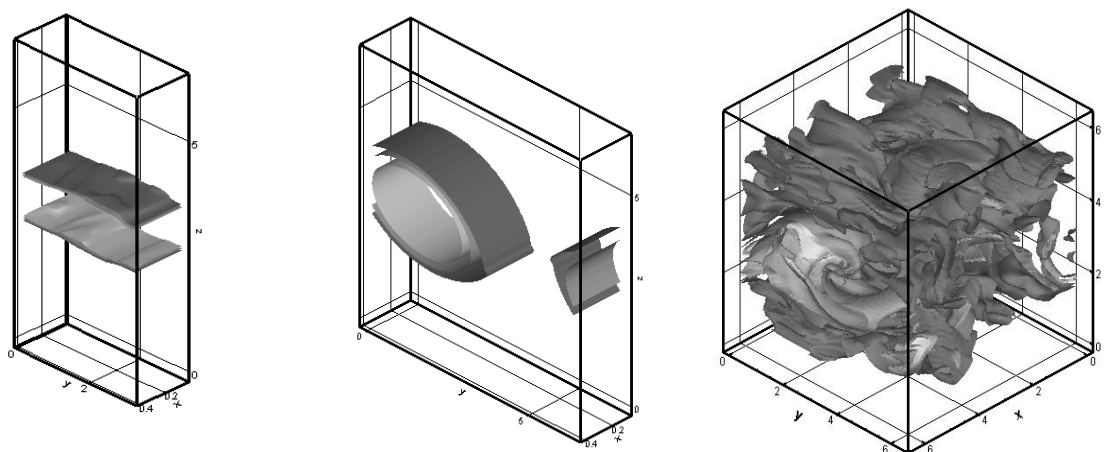
$$v = 2V(z - \pi) \quad \text{— линейный,}$$

$v = 2V(z - \pi) + A((0.25 - (z - \pi)^2)/0.25)$  – гиперболический,

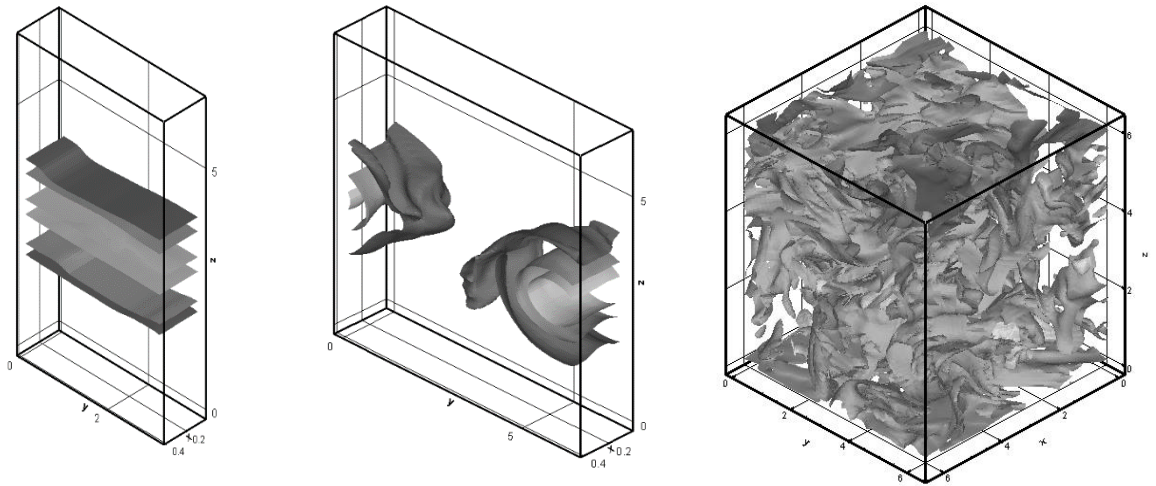
$v = 2V(z - \pi) + A \sin(2\pi - (z - \pi))$ . – синусоидальный. Параметр выпуклости

$A > 2.5$  определяет положительное направление профиля.

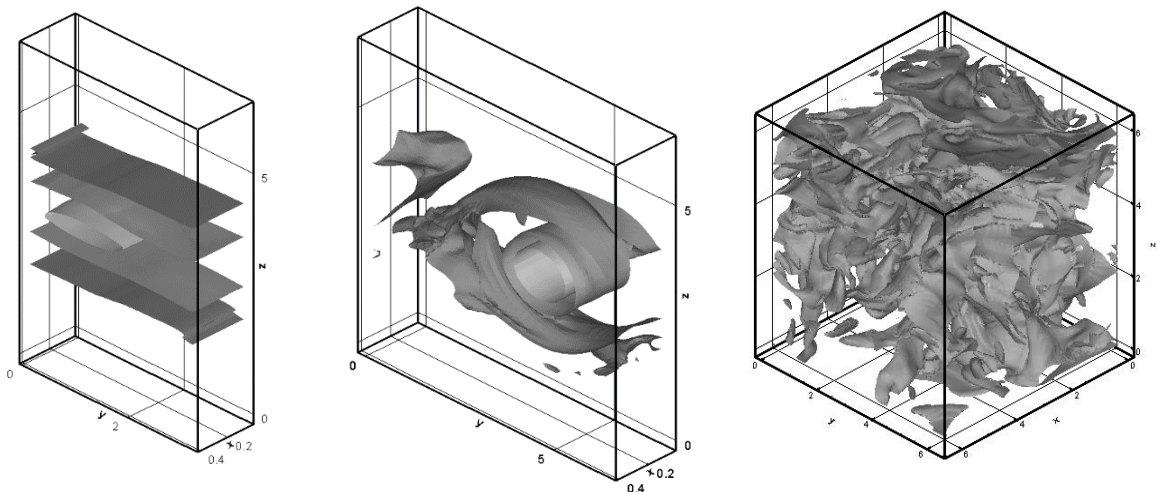
Течение Колмогорова для сдвигового слоя для различных профилей продольной составляющей скорости рассматривалось при различных размерах расчетной области, начиная с квазидвумерного случая  $L_x = \pi/8, L_y = \pi, L_z = 2\pi$  и кончая пространственным  $L_x = 2\pi, L_y = 2\pi, L_z = 2\pi$ . На **Фиг.6.15**, **Фиг.6.16**, **Фиг.6.17** показан переход от ламинарного течения в квазидвумерном случае к развитому вихревому течению в пространственном случае. Полученные результаты показывают, что при увеличении ширины области в поперечном направлении течение перестает быть ламинарным и представляет собой устойчивую во времени крупную структуру (вторичное течение). При дальнейшем увеличении расчетной области формируется вихревой каскад.



**Фиг.6.15** Переход к развитому вихревому течению в случае линейного профиля скорости в зависимости от размеров области: ламинарное течение, вторичное течение и развитое вихревое течение (слева направо). Изоповерхности плотности при  $t=10$



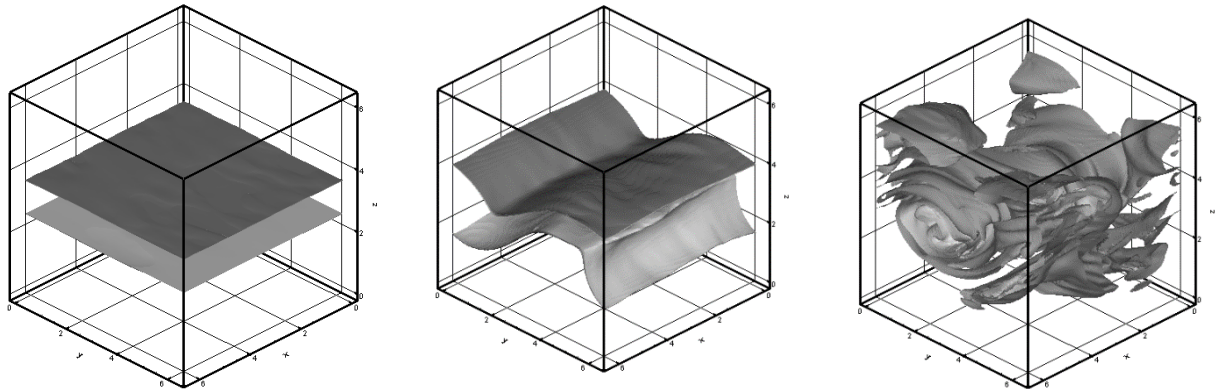
**Фиг.6.16** Переход к развитому вихревому течению в случае параболического профиля скорости в зависимости от размеров области: ламинарное течение, вторичное течение и развитое вихревое течение (слева направо). Изоповерхности плотности при  $t=1$



**Фиг.6.17** Переход к развитому вихревому течению в случае синусоидального профиля скорости в зависимости от размеров области: ламинарное течение, вторичное течение и развитое вихревое течение (слева направо). Изоповерхности плотности при  $t=10$

На **Фиг.6.18** показано, что скорость формирования вихревой структуры в задаче Колмогорова зависит от начального профиля скорости в слое

смешения. Вихревой каскад формируется быстрее в случае параболического профиля.



*Фиг.6.18* Изоповерхности плотности для развитого вихревого течения при  $t=5$  для различных профилей скорости: линейного, параболического и синусоидального

#### 6.4. Выводы

1. Изучена начальная стадия развития хаотического вихревого течения в сдвиговом слое, т.е. процесс формирования крупномасштабных образований и статистическое представление непрерывного потока энергии по каскаду вихрей.
2. Прямым численным моделированием показано, что переход к развитому вихревому течению осуществляется через вихревой каскад неустойчивостей. Выявлены условия, при которых данный каскад возникает.
3. Подтверждено, что именно трехмерная постановка является существенной для возникновения турбулентности.
4. В расчетах получен инерционный участок спектра энергии и подтвержден «закон  $-5/3$  Колмогорова» с точностью до 20 процентов.
5. Исследовано вихревое течение в сдвиговом слое при наличии внешней силы (течение Колмогорова). Показано ее влияние на формирование вихревых каскадов.

## **ПРИЛОЖЕНИЕ Численное моделирование двумерного течения невязкой сжимаемой жидкости под действием периодического поля внешней силы - паркет Колмогорова**

При работе над данным разделом диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования:

- Фортова С.В., Численное моделирование трехмерного течения Колмогорова для сдвигового слоя // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2013, том 53, № 3, с. 433–441.
- Фортова С.В., Крагинский Л.М., Чикиткин А.В., Опарина Е.И., Программный пакет для решения гиперболических систем уравнений // Математическое моделирование. – 2013, том 25, № 5, с. 123-135.
- Fortova S. V., Oparina E.I., Belotserkovskaya M.S., Numerical simulation of the Kolmogorov Flow under the influence of the periodic field of the external force // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 1128, 084501.

В приложении к Главе 6 рассматриваются вопросы, связанные с особенностями вихревых двумерных течений. Проведено численное моделирование двумерного течения невязкой сжимаемой среды, возникающее под действием периодического поля внешней силы.

Данная задача была предложена А.Н. Колмогоровым [176] для исследования развития неустойчивости и перехода к турбулентности. Изначально, задача о течении жидкости под действием периодической силы рассматривалась как удобный объект для аналитических исследований и была рассмотрена в работах [1,176-181]. Позже такое течение было реализовано в лабораторных условиях за счёт «магнитогидродинамического привода», позволившего создать в электролите периодическую силу, действующую на проводящую жидкость [177,178]. Целью этой главы является численное моделирование описанного эксперимента, получение когерентных структур типа вихревого «паркета» (паркет Колмогорова) и обратного энергетического каскада Крейчнана [182] с подтверждением «закона  $-5/3$ ».

### **6П.1 Введение**

Изучению устойчивости ламинарных течений по отношению к малым возмущениям, которые всегда существуют в природе, представляет

определенный интерес как для теоретических исследований, так и для практических приложений [164]. Это объясняется тем, что именно с вопросами устойчивости связано объяснение многообразных сложных движений жидкости, а также проблемы возникновения масштабных вихревых течений [1,164].

Несмотря на то, что трехмерная турбулентность – многообразное и существенно нелинейное явление, интерес к двумерной турбулентности привлекает к себе внимание многих исследователей [183-195]. Крейчнаном и Бэтчелором [182,172] было доказано, что турбулентность в двумерном случае обладает своими уникальными качествами, а не является упрощенным вариантом трехмерной турбулентности. Согласно [173], существенная разница между двумерной и трехмерной турбулентностью заключается в следующем. В трехмерном случае генерируются движения с масштабами, меньшими, чем масштаб, на котором возбуждается турбулентность (масштаб «накачки») [1,164]. При этом энергия распределяется по прямому каскаду с «законом  $-5/3$  Колмогорова» [173,159] на инерционном интервале спектра. В двумерном случае нелинейность приводит к возникновению движений, с масштабами, значительно превосходящими масштаб «накачки» с возникновением крупных когерентных структур [173]. Энергия может распределяться по обратному каскаду (от мелких структур к крупным) с «законом  $-5/3$  Крейчнана» [182,173], энстрофия же переносится с масштаба накачки в малые масштабы (прямой каскад) с «законом  $-3$ ». Такие движения встречаются при образовании циклонов и антициклонов, когда высота атмосферы составляет 10 км, а размер циклона-100 км, и течение можно отнести к квазидвумерному [164].

Обратный каскад в двумерной турбулентности исследовался экспериментально [185] и численно [186,187]. Особенности данных исследований является возникновение интенсивного крупномасштабного движения, включающего крупные вихри. В работе [188] в квадратной ячейке с периодическими граничными условиями численно получен вихревой диполь- стабильная когерентная структура. В натурном эксперименте [192] так же получена стабильная когерентная структура.

В [176] рассматривается рождение периодического автоколебательного режима как первого шага в переходе от ламинарного течения жидкости к турбулентному. Известно [164], что в плоском случае не существует строго определенной точки перехода: ламинарное течение преобразуется в полностью хаотическое при наличии в основном течении вторичных, как



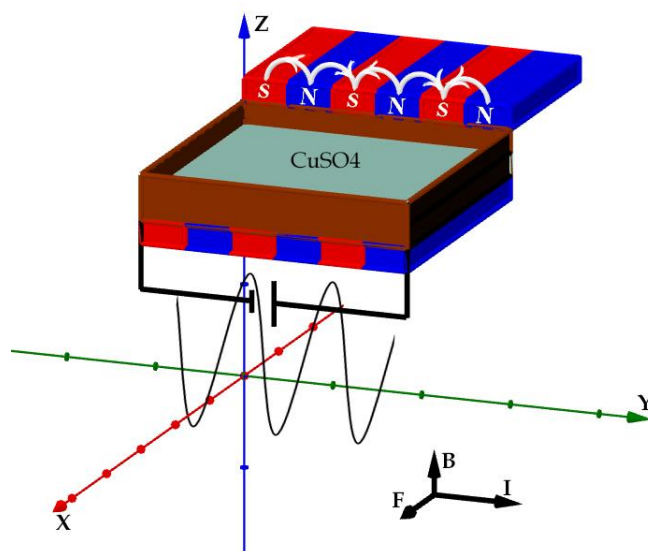
правило, колебательных движений. Представляет интерес получение общих картин течения в переходных областях, изучение динамики их поведения, определение критических значений параметров потока, а также нахождение автоколебательных периодических течений и возможностей перехода к хаосу [181]. В геофизике актуальным вопросом является изучение устойчивости такого класса течений, для которых масштабы неустойчивых возмущений соизмеримы с пространственным масштабом основного течения. Исследование данной темы, вероятно, поможет объяснить эволюцию циклонов и антициклонов в атмосфере, синоптических вихрей в океане и т.д [1,164,173].

В приложении к Главе 6 рассматривается задача, предложенная А.Н. Колмогоровым для изучения причин возникновения турбулентности в двумерном случае и экспериментально исследованную в работе [177]. Она представляет собой исследование плоского течения несжимаемой жидкости под действием периодической в поперечном направлении внешней силы. В линейной постановке эта задача исследовалась в работах [178,179], где был доказан факт потери устойчивости основного ламинарного течения относительно пространственно-периодических возмущений с большой длиной волны вдоль течения. Задаче о нелинейном развитии возмущений и возникновении вторичных стационарных или периодических течений при потере устойчивости ламинарного течения посвящены работы [179,181]. Однако, вопросы, связанные с существованием устойчивых стационарных или автоколебательных режимов вторичного течения, а также возможность перехода к хаосу в значительной степени пока остаются открытыми.

Мы предлагаем численное исследование задачи о плоском течении невязкой сжимаемой жидкости под действием периодической в поперечном направлении силы на основе методик, предложенных в пакете прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** [79]. В данной главе исследован процесс формирования вторичного течения (типа «вихревого паркета») при очень высоких числах Рейнольдса без учета вязких эффектов и влияния стенок (на основе системы уравнений Эйлера). Определены параметры течения, приводящие к возникновению «вихревого паркета» и последующей потере устойчивости вторичного течения [194,195].

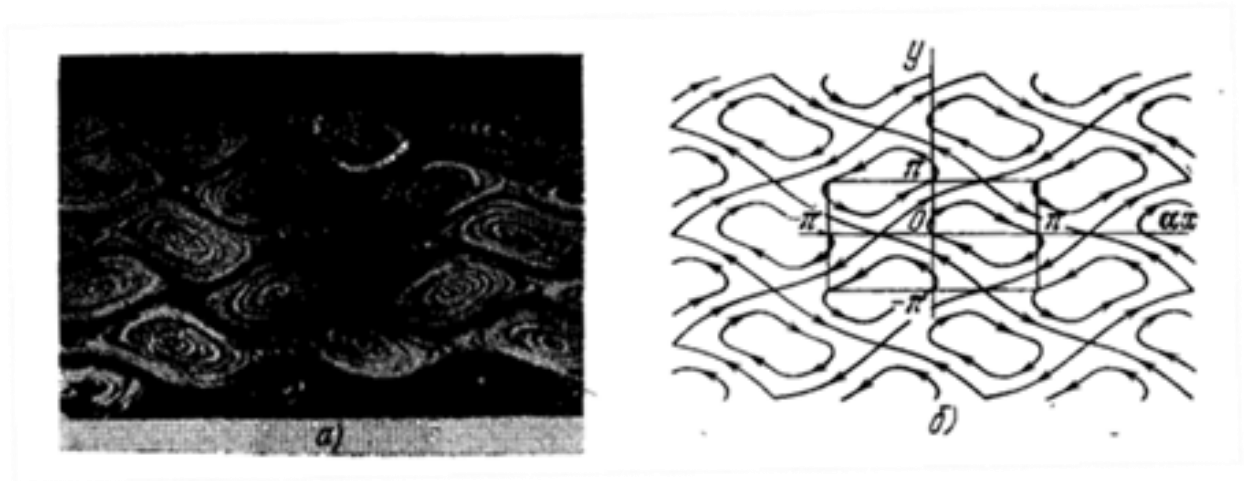
## **6П.2 Описание эксперимента**

Рассмотрим схему эксперимента из работы [177] (см. **Фиг. 6П.1**).



**Фиг. 6П.1.** Схема эксперимента

Плоская горизонтально расположенная прямоугольная кювета заполнялась электропроводящим водным раствором электролита ( $\text{CuSO}_4$ ). С помощью электродов, укрепленных на продольных боковых стенках кюветы, через электролит в поперечном направлении пропусклся постоянный электрический ток. Кювета с электролитом устанавливалась на лист магнитоэластичной резины, который служил источником внешнего магнитного поля (см. **Фиг. 6П.1**). Путем специального намагничивания была создана напряженность магнитного поля с профилем, близким к синусоидальному. Таким образом, на движущуюся жидкости действовала электромагнитная сила Лоренца. В результате данного эксперимента авторам удалось получить четкую картину автоколебательного режима вихревых структур, называемых «вихревым паркетом» или «паркетом Колмогорова» (см. **Фиг. 6П.2**).



Фиг. 6П.2 Картина «вихревого паркета»

### 6П.3 Постановка задачи. Численная методика

Сформулируем математическую постановку эксперимента, описанного в предыдущем разделе.

Рассмотрим задачу о плоском течении невязкой слабо сжимаемой жидкости под действием внешней периодической силы, направленной вдоль оси  $X$  и равной  $\rho G \sin ky$ . Здесь  $G$  – сила Лоренца, равная векторному произведению силы тока, пропускаемого через жидкость, на напряженность магнитного поля,  $k$  – волновое число, задающее период действия силы (далее  $k=1$ ). Данная постановка предполагает действие на жидкость постоянного тока, пропускаемого через среду. Движение среды в данном случае описывается уравнениями Эйлера в следующем виде [164]:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) &= 0 \\
 \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{V}) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho G \sin ky \\
 \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \mathbf{V}) &= -\frac{\partial p}{\partial y} \\
 \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho E + p) \mathbf{V}) &= \rho u G \sin ky \\
 \mathbf{V} = (u, v)^T, E = e + \mathbf{V}^2 / 2, p = (\gamma - 1) \rho e &
 \end{aligned} \tag{6.6}$$

Здесь  $u, v$  – составляющие вектора скорости соответственно по осям  $X$  и  $Y$ ;  $P$  – давление;  $E$  – кинетическая энергия;  $\rho$  – плотность. Течение исследуется в прямоугольной области, на границах которой ставятся условия периодичности.

Известно, что для несжимаемой жидкости наиболее неустойчивыми являются длинноволновые возмущения, наложенные на основное поле течения [1]. Поэтому в качестве начальных условий для поля скоростей применяется суперпозиция скорости основного течения вида  $u = \sin y$ , и наложенных на основное течение малых возмущений  $A \sin(cx)$ . Такая постановка начальных условий позволила получить аналог автоколебательного режима («вихревого паркета»). Исследуются два вида начальных условий для скорости в продольном направлении:  $u_0 = 0.1 \sin(y) + 0.005 \sin(2x)$  и  $u_0 = 0.1 \sin(y) + 0.005 \sin(4x)$  соответственно. Скорость в поперечном направлении  $v$  в начальный момент времени равна 0. Остальные значения основных параметров течения соответствуют данным из экспериментального исследования [177]:

$$\rho_0 = 1000 \text{ кг/м}^3, \quad G = 10^{-2} \text{ Н/кг}, \quad p = 10^5 \text{ Па}$$

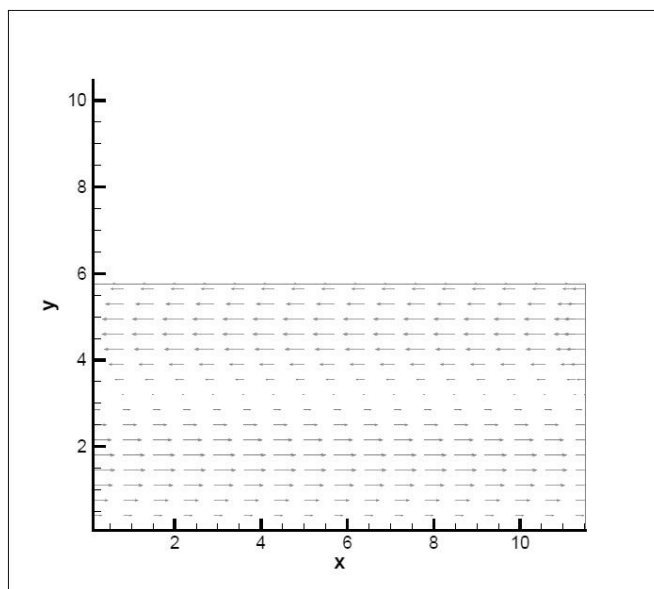
В качестве расчетной области используется прямоугольник размером  $|X| \leq 8\pi, |Y| \leq 4\pi$ .

Численное решение поставленной задачи выполняется с использованием вычислительного комплекса **HYPERBOLIC\_SOLVER** [194], позволяющего решать различные задачи динамики сплошных сред, описываемые гиперболической системой уравнений. Большая часть расчётов была выполнена с помощью гибридной схемы [68,164]. Достоинства этой схемы перечислены в Главах 2-3 диссертации. Для верификации результатов использовался также метод крупных частиц. Однако, метод крупных частиц первого порядка по времени оказался недостаточно точным для разрешения некоторых структур, а использование метода второго порядка часто приводило к численной неустойчивости. Поэтому гибридная схема второго порядка была выбрана в качестве основной. Большая часть расчётов выполнялась на сетках  $100 \times 100$  и  $200 \times 200$ . Для проверки сеточной сходимости использовались сетки  $400 \times 400$ .

## 6П.4 Результаты расчетов

### 6П.4.1 Невозмущенная среда

В теоретической и экспериментальной модели для течения Колмогорова несжимаемой жидкости в качестве начальных условий задаётся покоящаяся среда [177,181]. В несжимаемом вязком случае уравнения имеют стационарное ламинарное решение  $u = \sin(ky)$ . В невязком сжимаемом случае такого стационарного решения не будет, и, если задать в качестве начальных условий нулевые скорости, решение не сойдётся к стационарному. Это обусловлено тем, в систему уравнений включается уравнение энергии, которое не включается в систему уравнений в несжимаемом случае. Расчеты показали, что на начальном этапе реализуется решение, близкое к стационарному решению для несжимаемой жидкости, показанное на **Фиг.6П.3**:



**Фиг.6П.3** Синусоидальный профиль скорости, стрелками показан вектор скорости

Однако, в отличие от несжимаемого случая, в данном течении не происходит перехода к неустойчивости [164].

### 6П.4.2 Возмущение продольной компоненты скорости

Известно [1,164], что для несжимаемой жидкости наиболее неустойчивыми являются длинноволновые возмущения по оси  $X$ , наложенные на основное поле течения. Поэтому в расчёте начальное условие сразу задавалось в виде суммы основного течения, взятого по аналогии с

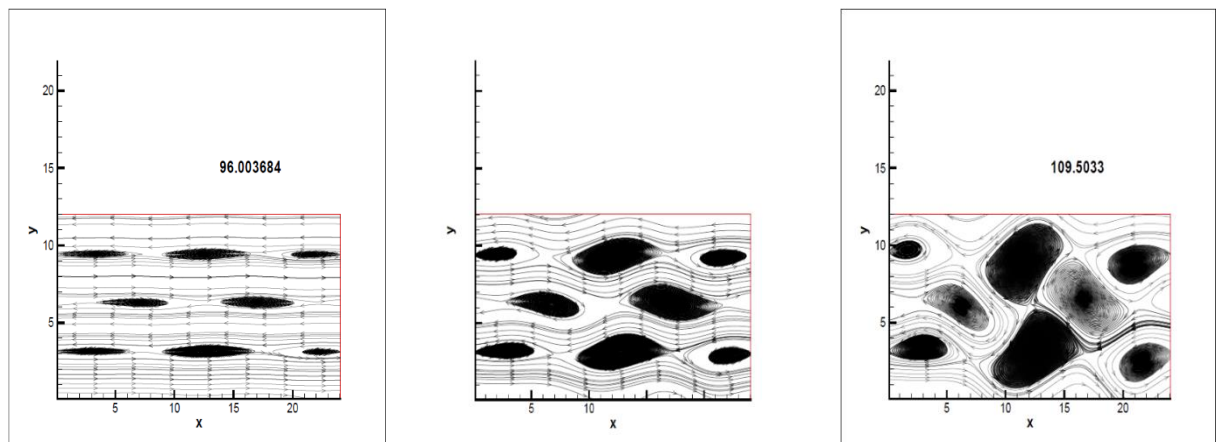
несжимаемой задачей как  $\sin y$  и наложенных малых возмущений вида  $A \sin(cx)$ .

Такая постановка позволила получить аналог автоколебательного режима («паркета Колмогорова»).

На **Фиг. 6П.4** и **Фиг. 6П.5** показаны картины течения в разные моменты времени для двух вариантов начальных условий:  $u_0 = 0.1\sin(y) + 0.005\sin(2x)$  и  $u_0 = 0.1\sin(y) + 0.005\sin(4x)$  соответственно.

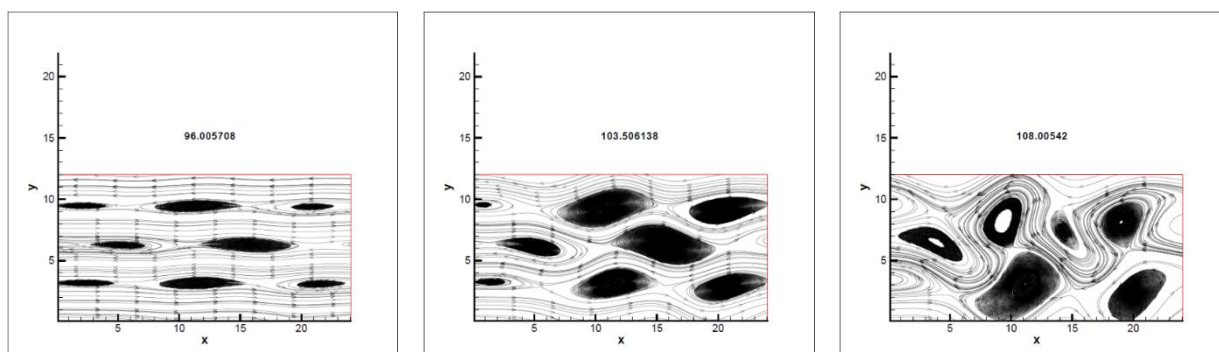
Многочисленные эксперименты, что картина вихрей не зависит от начального возмущения, если оно невелико, т.е. не зависит от частоты возмущения  $c$  при амплитуде  $A < 0.01$ .

Во всех случаях наблюдается один и тот же сценарий развития течения: сначала образуются вихри, такие же, как и в эксперименте для слабо закритического режима [164], потом вихри начинают деформироваться, объединяться и в результате образуется крупная структура. Возникает обратный каскад [182,173].



**Фиг. 6П.4:** Решение задачи с начальным условием  $u_0 = 0.1\sin(y) + 0.005\sin(2x)$  в моменты времени  $T=96, 102$  и  $109$ . Показаны линии тока

Таким образом, при определенном начальном возмущении скорости наблюдается следующий сценарий развития двумерного невязкого течения сжимаемой среды: сначала образуются вихри, такие же, как и в эксперименте [177], потом вихри начинают увеличиваться и в конечном итоге образуется один большой вихрь. В динамике данный процесс можно описать следующим образом: под действием периодической силы наблюдается постепенный переход от ламинарного течения к вторичному («вихревому паркету»). Это происходит к моменту времени 85 секунд при начальном возмущении скорости  $u_0 = 0.1\sin(y) + 0.005\sin(2x)$ . Заметим, что в отличие от результатов, полученных в [181], данное течение не имеет автоколебательной особенности. Можно сделать вывод о различии в сценариях формирования «вихревого паркета» для течения Колмогорова для модели уравнений Эйлера (невязкая среда) и модели Навье-Стокса (вязкая среда). Для течений, полученных при расчетах по модели уравнений Эйлера, динамика течения осуществляется путем формирования «вихревого паркета» с последующим развитием обратного каскада [182,194,195].



**Фиг. 6П.5:** Решение задачи с начальным условием  $u_0 = 0.1\sin(y) + 0.005\sin(4x)$  в моменты времени  $T=96, 103$  и  $108$ . Показаны линии тока

### 6П.4.3 Приближения

Чтобы качественно оценить влияние

- 1) учёта источника в уравнении энергии;
- 2) вязких эффектов

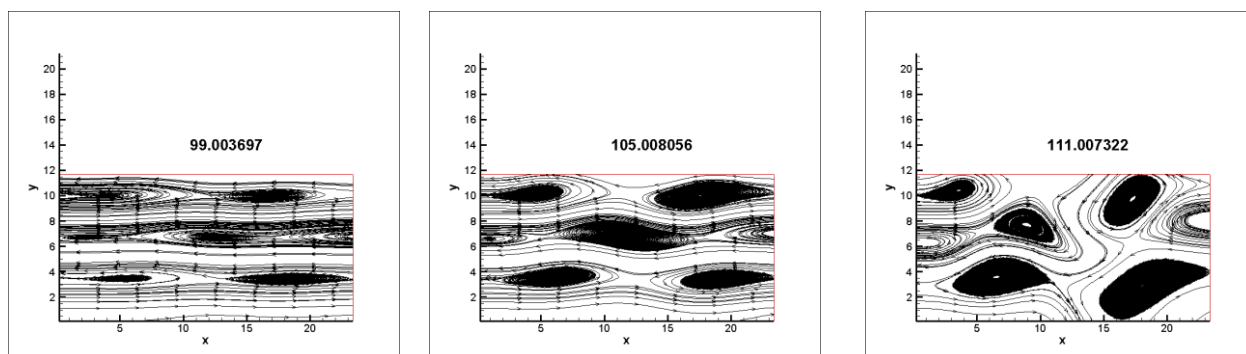
были проведены расчёты по нескольким приближённым моделям.

### 6П.4.3.1 Учёт источника

В несжимаемом случае в систему уравнений модели не входит уравнение энергии. В сжимаемом случае это уравнение появляется, причем в правую часть входит член, связанный с работой действующей силы Лоренца (т.к. учитывается сила только по одному направлению). В связи с этим интересно проверить, насколько сильно этот член влияет на решение.

На **Фиг.6П.6** приведены результаты расчёта без учёта силового члена в уравнении энергии. Начальные данные такие же, как в предыдущем разделе.

В этом случае так же образуются вихри, но рисунок другой: в верхнем и нижнем «ряду» по 2 вихря (в предыдущем случае 3), в среднем «ряду» – те же 2 вихря, но смещённые по оси X (в предыдущем случае два вихря симметричны относительно центра). Остальные случаи с возмущением продольной скорости дают тот же результат: в расчётах с данным приближением образуется система вихрей, но не такая, как в расчётах по полной модели.



**Фиг.6П.6** Решение задачи без учёта силы в уравнении энергии, начальное условие  $u_0 = 0.1\sin(y) + 0.005\sin(4x)$  Показаны линии тока в различные моменты времени

### 6П.4.3.2 Учёт искусственной вязкости

Наряду с описанным выше приближением, приближенно в отдельных расчетах учитывается вязкость. Применялось несколько приближений:

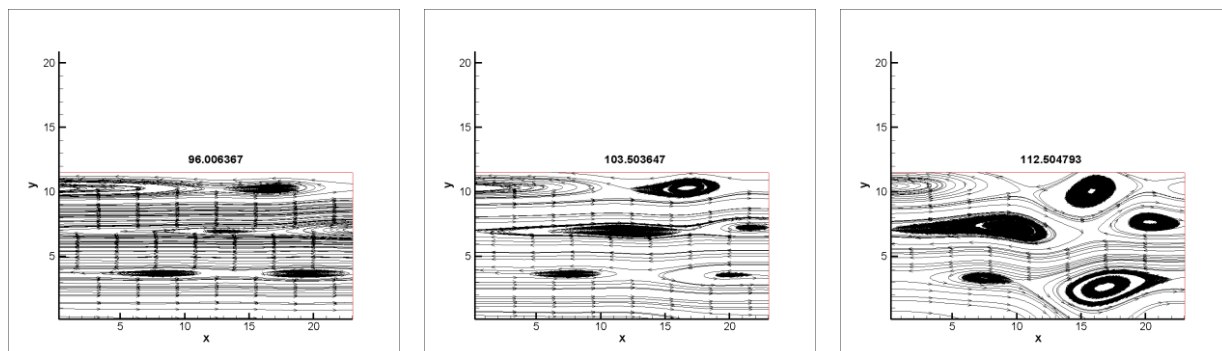
- 1) в правую часть уравнения импульсов по оси X добавляется член  $\mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$
- 2) в правую часть уравнения импульсов по оси Y добавляется член  $\mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

Вторые производные аппроксимировались центральными разностями 2-го порядка точности.



Расчёты показали, что во всех трёх случаях для значений вязкости  $\mu \leq 10^{-1} \text{ Па}\cdot\text{с}$  её учет не сильно сказывается на решении. Для сравнения, вязкость воды  $m = 10^{-3} \text{ Па}\cdot\text{с}$ .

На **Фиг.6П.7** приведены результаты расчёта для  $m \gg 10^{-3} \text{ Па}\cdot\text{с}$ . Сценарий развития течения тот же, что и без учёта вязкости, причем образование и разрушение вихрей происходит почти в одно и то же время.

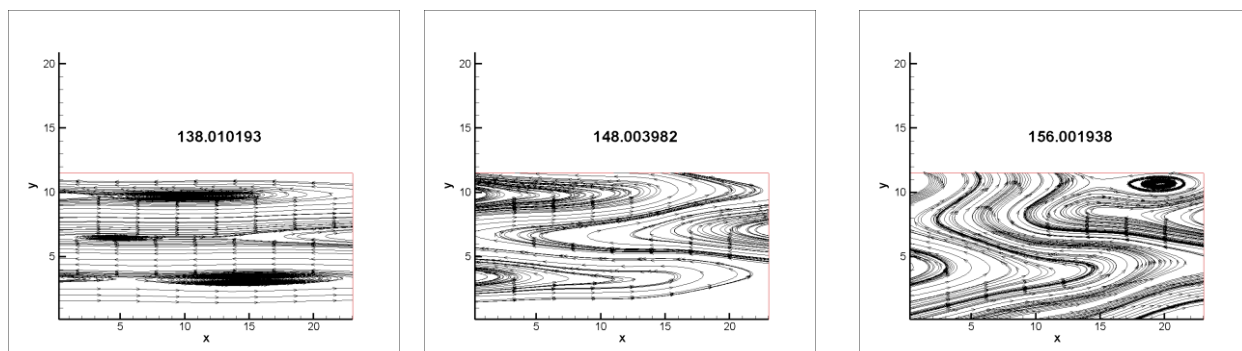


**Фиг.6П.7** Решение задачи с учетом вязкости  $\mu \approx 10^{-3} \text{ Па}\cdot\text{с}$ . Показаны линии тока в различные моменты времени

При больших значениях вязкости характер течения заметно меняется:

- 1) вихри образуются позже -при больших временах;
- 2) картина вихрей меняется (в верхнем и нижнем ряду один вихрь);
- 3) вихри пропадают и снова образуются, разрушение происходит в течение большего времени.

На **Фиг.6П.8** приведены результаты расчёта с  $m \gg 10 \text{ Па}\cdot\text{с}$ .



**Фиг.6П.8** Решение задачи с учетом вязкости  $\mu \approx 10$ . Показаны линии тока в различные моменты времени.

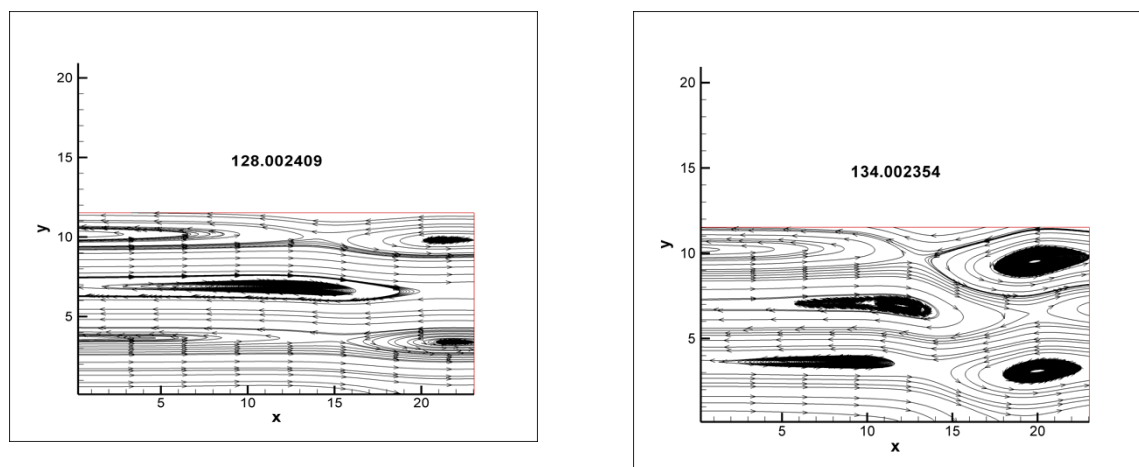
Данные результаты помогают сделать только качественные выводы – что при больших значениях вязкости характер автоколебательного режима может сильно меняться. Для более точного описания сжимаемых течений с большой вязкостью следует пользоваться более адекватной моделью (например, системой уравнений Навье-Стокса). Результаты данного исследования представлены в разделе **6П.4.5**.

#### 6П.4.4 Исследование влияния величины плотности

На **Фиг.6П.9** приведены результаты расчёта со значением плотности  $\rho = 100 \text{ г/см}^3$ . Вихри образуются позже, чем при плотности картина вихрей также отличается.

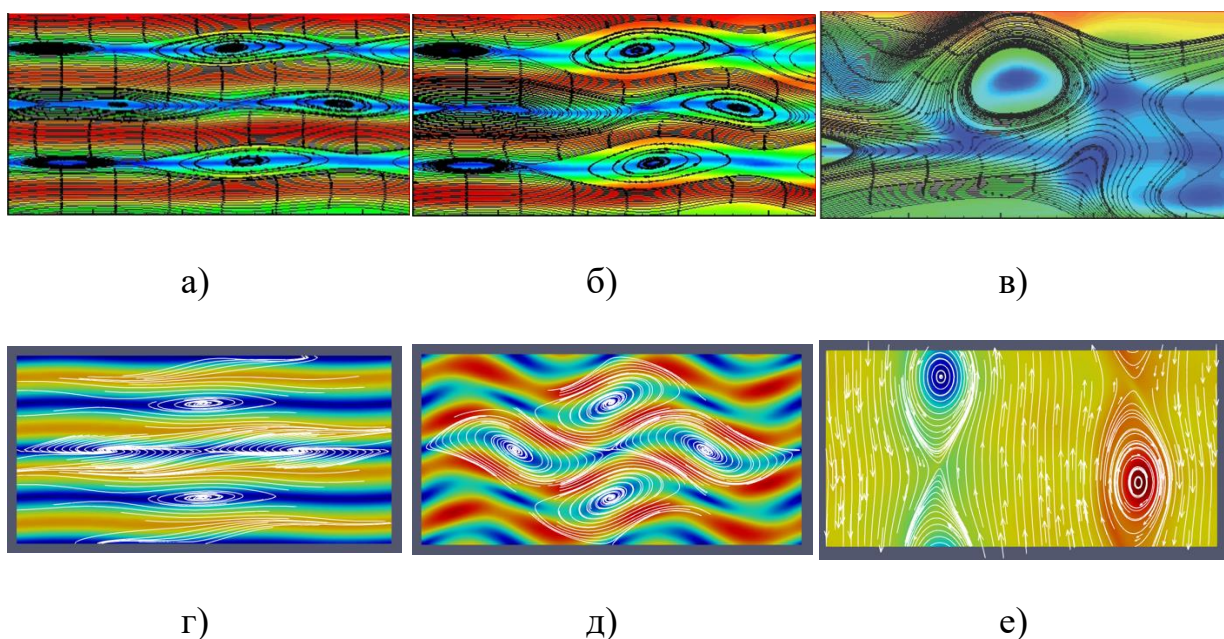
При меньших значениях плотности  $\rho = 10 \text{ г/см}^3$  и  $\rho = 1 \text{ г/см}^3$ , на временах  $T < 300$  не происходит перехода к автоколебательному режиму, течение стабилизируется при тех же возмущениях скорости.

При больших значениях плотности  $\rho = 5000 \text{ г/см}^3$  картина течения такая же, как в случае  $\rho = 1000 \text{ г/см}^3$ , но образование вихрей происходит раньше.



**Фиг.6П.9** Решение задачи с плотностью  $\rho = 100 \text{ г/см}^3$ . Показаны линии тока

### 6П.4.5. Сравнение с расчетом по системе уравнений Навье-Стокса



**Фиг.6П.10** Формирование «вихревого паркета» и его распад при численном моделировании задачи Колмогорова. Линии тока и модуль скорости для невязкого а) - в) и вязкого г)-е) случаев

Рассмотрим различия, наблюдаемые в расчетах данной задачи по системам уравнений Эйлера и Навье-Стокса (см **Фиг.6П.10**). Численное моделирование в случае вязкого течения при минимальном коэффициенте вязкости, проведенное с помощью системы уравнений Навье-Стокса, также показывают наличие обратного каскада. Отличием от невязкого случая при развитии обратного каскада является наличие двух крупных структур, а не одной (как в случае невязкого течения). Также можно отметить, что в вязком случае течение развивается медленнее, чем в невязком.

Дальнейшее исследование влияния вязкости на формирование когерентных структур течения Колмогорова требует перехода к более подробным расчетным масштабам (диссипативный интервал энергетического спектра) и, как следствие, требует использования более мелких расчетных сеток.

В рамках разработанного исследовательского пакета программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** существует возможность вести численное моделирование с применением «искусственной вязкости», – учетом влияния тензоров вязких напряжений и скоростей деформаций. Для этого в пакете программ предусмотрен специальный блок **RightHandTerms\_Viscous**. Для разрешения более мелких масштабов вихревого течения и учета пристеночных явлений необходимо использование многопроцессорных вычислительных систем высокой производительности. На данный момент в стадии разработки находится блок пакета, реализующий сеточную технологию **Building\_Cube**, позволяющую при помощи адаптивных методик получить сгущение сетки в тех частях расчетной области, которые нуждаются в более точном пространственном разрешении.

### **6П.5 Выводы**

1. Проведено численное моделирование процесса формирования вихревого режима течения типа «вихревого паркета» в слое слабо сжимаемой нормальной среды на основе уравнений Эйлера.
2. Показано, что на формирование данного течения существенное влияние оказывают начальные условия. А именно, малое возмущение компонент скорости приводит к возникновению «вихревого паркета».
3. В процессе численного эксперимента обнаружена неустойчивость сформировавшегося течения, образование крупного вихря и возникновение обратного каскада. Результаты данного исследования показывают, что развитие процесса потери устойчивости вторичного течения может происходить при отсутствии влияния вязкости и стенок.
4. Проведено сравнение численных экспериментов для вязких и невязких сред. Показано, что реализация когерентных структур в исследованном случае происходит как для невязкого, так и для вязкого случая.

## ГЛАВА 7 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО СОУДАРЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИН. НЕУСТОЙЧИВОСТЬ КОНТАКТНОЙ ГРАНИ

Глава 7 посвящена численному исследованию процесса высокоскоростного соударения металлических пластин применительно к взрывным экспериментам [196,197], характерным для ударно-волновых промышленных технологий [196,198,199,200]. Используя автомодельные решения и сквозные одномерные, двумерные и трехмерные коды пакета **HYPERBOLIC\_SOLVER** нестационарной гидродинамики рассчитаны поля гидродинамических параметров сталкивающихся металлов, характеристики возникающих ударных волн и волн адиабатической разгрузки Римана, их кинематика, динамика и интенсивность. В трехмерной постановке изучено развитие неустойчивости Рэлея-Тейлора на контактной границе «мишень-ударник». Воспроизведено наблюдаемое во взрывных экспериментах [197] образование кольцевых структур. Исследован процесс кратерообразования и рассчитаны их основные характеристики. В расчетах использованы различные виды уравнения состояния металлов из Главы 5 диссертации.

При работе над данным разделом диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования:

- Белоцерковский О.М., Фортова С.В., Трошкин О.В., Пронина А.П., Ериклинцев И.В., Козлов С.А., Численное моделирование высокоскоростного столкновения металлических пластин // Математическое моделирование. – 2016, том 28, № 2, с. 19-30.
- Fortova S.V., Utkin P.S., Shepelev V.V. Application of software complex turbo problem solver to Rayleigh-Taylor instability modeling // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – vol. 754. – Paper 062003.
- Lomonosov I.V. and Fortova S.V., Wide-Range Semiempirical Equations of State of Matter for Numerical Simulation on High-Energy Processes // High Temperature. – 2017, vol. 55, № 4, pp. 585-610.
- Fortova S.V., Utkin P.S., Narkunas T.S., Shepelev, V.V. Numerical simulation of the impact of high-speed metallic plates using two approaches // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. – 2017. – vol. 899. – Paper 052006.
- Fortova S.V., Utkin P.S., Pronina A.P., Narkunas T.S., Shepelev V.V. Improvement of three-dimensional mathematical for the simulation of impact of

- high-speed metallic plates // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – vol. 946. – Paper 012052.
- Utkin P.S., Fortova S.V. Numerical modeling of dense flows of two-phase media with shock waves using two-fluid model // AIP Conference Proceedings. – 2018. – vol. 2027. – Paper 030107.
  - Уткин П.С., Фортова С.В. Двухжидкостная модель высокоскоростного соударения металлических пластин // Горение и взрыв. – 2018. – Т. 11, № 4. с. 118-124.
  - Уткин П.С., Фортова С.В. Математическое моделирование высокоскоростного взаимодействия металлических пластин в рамках двухжидкостного Эйлера подхода // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2018. – том 58, № 8. с. 90-96.
  - Фортова С.В., Уткин П.С., Казакова Т.С. Трехмерное численное моделирование развития неустойчивости контактной границы сталкивающихся металлических пластин в газодинамическом приближении // Теплофизика высоких температур. – 2019. – том 57, № 2. с. 262-268.

## 7.1 Введение

Сварка и упрочнение металлов при высокоскоростных импульсных процессах представляют собой наиболее значимые примеры взрывных технологий [196-201], позволяющие осуществлять надежное соединение широкого класса материалов, которые невозможно сварить и упрочнить иными методами [196]. Открытое случайно при изучении бронепробития кумулятивными снарядами академиком М.А. Лаврентьевым, явление сварки взрывом превратилось сегодня в обширную отрасль промышленности с многомиллионным и масштабным выпуском биметаллической продукции с развитой промышленно-технологической базой производства биметаллических соединений.

Вместе с тем, многие вопросы динамики и теплофизики импульсных явлений при взрывной сварке и упрочнении, происходящих при экстремальных энерго-выделениях, пока что далеки от полного понимания [196-200]. Это связано с необходимостью описания сугубо нелинейных ударно-волновых процессов при экстремально высоких давлениях, температурах и плотностях энергии, сложностью соответствующих физико-химических и гидродинамических явлений, слабой разработанностью средств диагностики быстротекущих (микросекундной длительности) процессов,

сверхвысокими скоростями деформации и многими иными осложняющими особенностями, содержательное изучение которых возможно по-видимому только численными методами [201,164,202,10].

Здесь мы сосредоточимся на взрывном эксперименте по высокоскоростному соударению свинцовых пластин с пластинами из других металлов [197]. В данной работе исследованы особенности динамических процессов, происходящих в приграничных слоях соударяемых пластин и получен ряд новых и нетривиальных результатов.

Как показывают оценки [196-199], в течение короткого времени (порядка 10 мкс) после удара металлы находятся в квазипластическом состоянии и способны деформироваться псевдожидкостным образом [196-198] прежде, чем начнется процесс перехода к упругому состоянию. Косвенным доказательством этого факта является изучение стальной пластины [197] после сверхзвукового удара, на поверхности которой были обнаружены явно выраженные кратерообразные круговые выплески в сторону свинцовой пластины. Здесь сделано предположение, что природа возникновения этих кратеров может заключаться в развитии неустойчивости Релея-Тейлора (РТ) на контактной границе соударяющихся пластин [196,197]. При этом, как будет показано ниже, данный вид неустойчивости возникает в волне разрежения (ВР) [197], приходящей на границу раздела пластин со стороны свободной поверхности свинца, после распада разрыва в момент удара с образованием двух расходящихся ударных волн (УВ). В условиях эксперимента [197] ускорение в ВР направлено в сторону металла меньшей плотности, что является необходимым условием возникновения неустойчивости РТ (градиенты скорости и плотности должны иметь разные знаки) [203].

Как мы увидим ниже, возникающее в момент столкновения пластин давление значительно превышает динамические пределы прочности и упругости соударяющихся металлов. Поэтому здесь нами будет использована гидродинамическая модель [131,127], в которой давление, внутренняя энергия и плотность (УРС) связаны уравнением состояния (см. Главу 5):

$$p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon + (\rho - \rho_0)c_0^2, \quad (7.1)$$

где  $\rho_0$  и  $c_0$  – плотность и скорость звука в «холодном» веществе. В результате одномерного гидродинамического анализа было установлено [203], что возникающие волны разрежения выходят на контактную поверхность металлов, вызывая в них растягивающие напряжения. Этот эффект часто

встречается в динамической физике высоких давлений и носит название «откол» [131].

В [201] моделируется двумерное столкновение пластин с искусственно искривленной формой контактной границы, что искривляет и соответствующие волны, а соответствующие волны разрежения, проходя через контактную границу, создают знакопеременное ускорение, приводящее к развитию неустойчивости РТ.

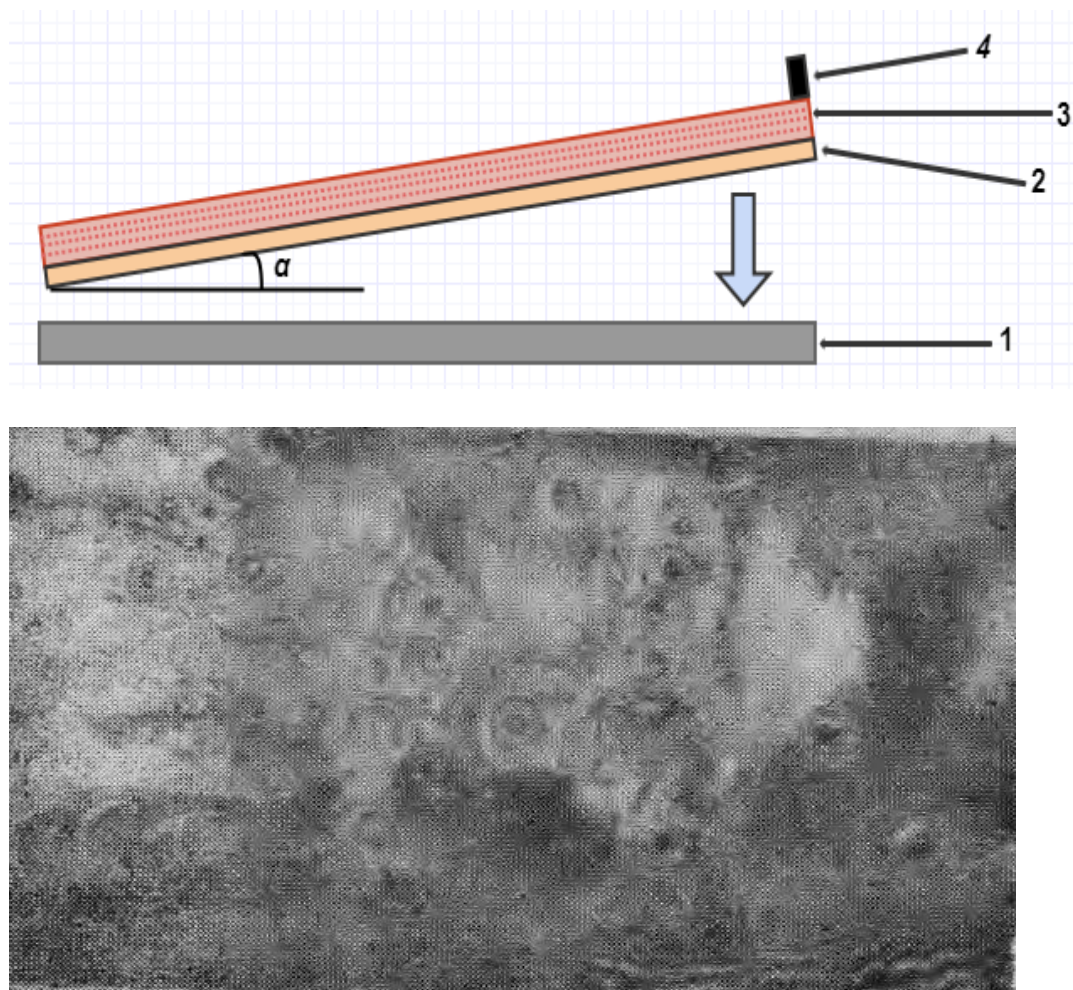
Еще один вариант постановки задачи для моделирования высокоскоростного столкновения металлических пластин представлен в нашей работе [203], где решаются трехмерные уравнения Эйлера с использованием уравнений состояния идеального газа. Как показывают оценки, в рассматриваемой области реализуется ускорение, направленное от свинцовой пластины в сторону стальной, порядка  $10^7$  м/с<sup>2</sup>. В качестве начального условия используется точечное возмущение скорости в центре контактной границы между сталкивающимися пластинами. В результате численного моделирования авторам [203] удалось воспроизвести выплеск металла в сторону свинцовой пластины.

Целью данной главы является численное исследование динамики процесса сверхзвукового соударения металлических пластин и изучение развития неустойчивости контактной границы в рамках газодинамического приближения с использованием пакета прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER** и полуэмпирического уравнения состояния среды из Главы 5.

## 7.2 Оценка газодинамических условий соударения

В дальнейшем мы будем ориентироваться на взрывной эксперимент [197], схема которого приведена на **Фиг. 7.1**.





**Фиг. 7.1** Схема взрывного эксперимента [197]. 1 – стальная пластина, 2 – метаемая взрывом свинцовая пластина, 3 – заряд взрывчатого вещества, 4 – детонатор

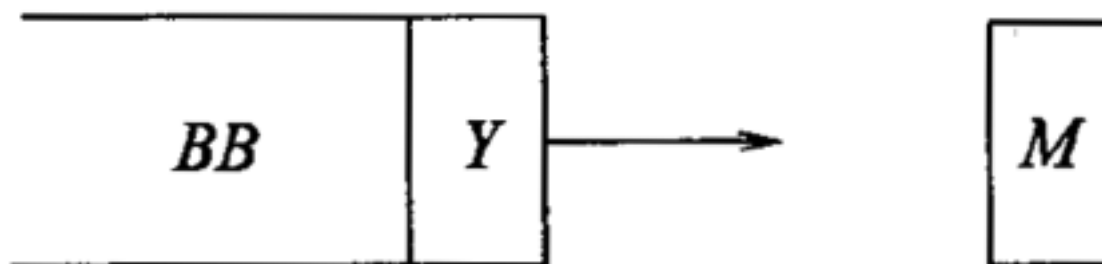
На неподвижную стальную пластину (1) скользящей детонационной волной мощного конденсированного взрывчатого вещества (3) метается плоская свинцовая пластина (2). При этом метаемая свинцовая пластина разворачивается продуктами детонации на угол  $\alpha$ , приобретает вертикальную скорость около 500 метров в секунду и соударяется под нулевым углом (плоско) с неподвижной пластиной (1).

Как мы покажем ниже, при высокоскоростном ударе на границе раздела металлов возникают мощные ударные волны с амплитудными давлениями в десятки ГПа, что значительно превосходит пределы динамической упругости соударяющихся металлов, составляющие для свинца, меди и железа  $S_{Fe}^* = 1$  ГПа,  $S_{Cu}^* \gg 0.1$  ГПа,  $S_{Fe}^* \lesssim 0.1$  ГПа [204]. Таким образом, в течение  $(1-10) \cdot 10^{-6}$  секунд материал ударника и мишени находятся в пластическом

(псевдожидком) состоянии. После чего по мере падения давления в волнах разгрузки ниже предела упругости и перехода металла в упруго-пластическое состояние возникает упруго-пластический режим течения [196-198]. В этом режиме прочностные эффекты останавливают дальнейшее гидродинамическое движение среды. В наших расчетах мы будем рассматривать именно эту гидродинамическую стадию процесса вплоть до упруго-пластического режима с  $P < S^*$ . В пользу такого механизма течения свидетельствуют оценки характерных возникающих давлений [203,84], а также исследование сохраненной после удара стальной пластины, на поверхности которой экспериментаторами были обнаружены кольцевые кратерообразные выплески (Фиг. 7.1) [197] из-за развития неустойчивости Рэля-Тейлора.

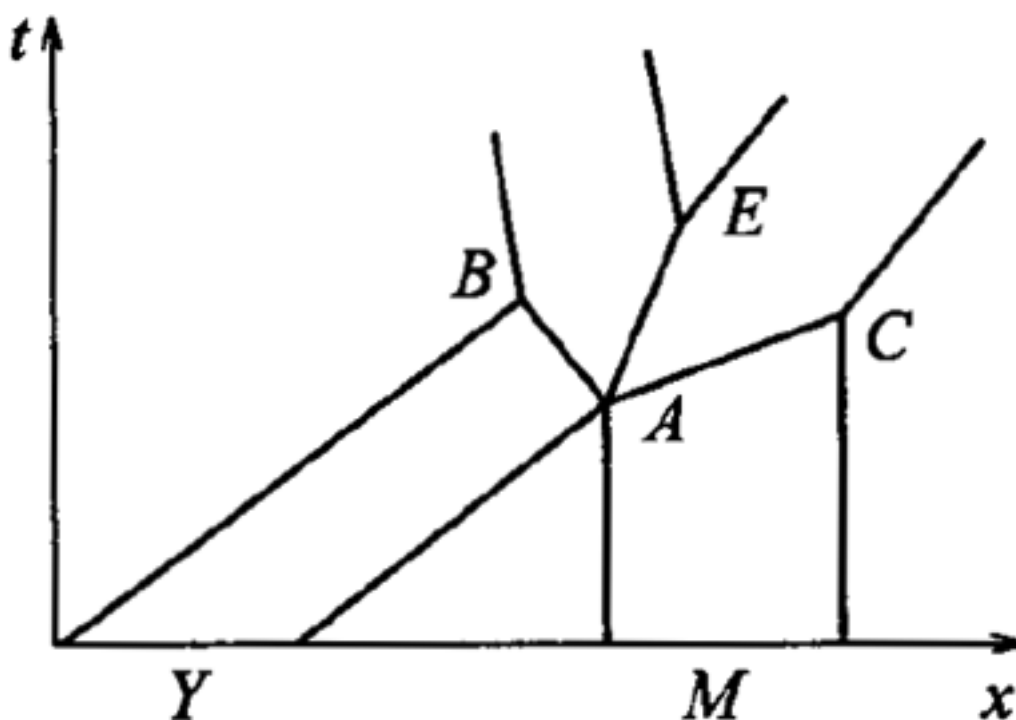
Прежде, чем переходить к изложению расчетного материала, на основе одномерных автомодельных решений динамики ударных волн [131,127], проанализируем общую картину возникающих при ударе течений и возникающие здесь характерные параметры задачи.

Начнем с оценки уровня давлений, возникающих при соударении плоского свинцового ударника с плоской мишенью из стали, железа или меди. Согласно [131], начальная стадия столкновения плоских пластин строится как комбинация трех автомодельных решений- плоской стационарной ударной волны УВ, центрированной волны расширения Римана Р и области постоянного течения.



Фиг.7.2 Схема опыта в методе торможения

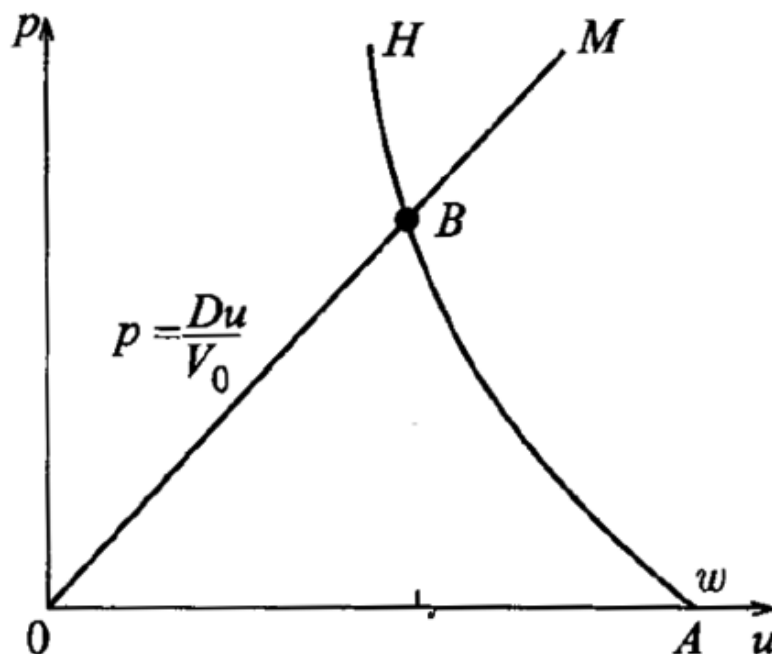
Упрощенная схема опыта [197] после поворота ударника на угол  $\alpha$  перед его ударом о мишень приведена на Фиг.7.2.



**Фиг.7.3** Упрощенная  $x-t$  диаграмма для опыта [197]

В момент удара  $A$  на **Фиг.7.3** по ударнику и мишени побегут ударные волны  $AB$  и  $AC$ , которые, выйдя на свободные поверхности ударника и мишени в точках  $B$  и  $C$  отразятся центрированными волнами разгрузки Римана. Давления  $P$  и массовые скорости  $U$  по обе стороны контактной границы  $AE$  между телами одинаковы и равны тем же величинам на фронте ударных волн  $AB$  и  $AC$  до тех пор, пока последние не достигают других границ образцов  $B$  и  $C$ . Той же скоростью  $U$  обладает и сама контактная граница (линия  $AE$ ).

По определению, на контактной поверхности (условия непротекания [131]) скачок массовой скорости и давления ударных волн в ударнике и мишени будут одинаковы. Поэтому для определения давления ударно-сжатых материалов удобно воспользоваться  $P-U$  диаграммой [131] (см. **Фиг.7.4**).



**Фиг.7.4**  $Pu$ -диаграмма для опыта с торможением [131].  $HNA$ - ударная адиабата ударника,  $A$ - его исходное состояние,  $w$ - скорость его полета,  $OBM$ - «волновой луч» [131] покоящейся мишени с учетом наклона  $D/V_0$ ,  $B$ - состояние в мишени и ударнике в момент удара

Полуэмпирические уравнения состояния (см. Главу 5) дают нам зависимость давления  $P$  от массовой скорости  $u$  ударника и мишени  $P_{y,m} = f_{y,m}(u)$ . С другой стороны, давление  $P$  связано со скачком массовой скорости в мишени условием на ударной адиабате Гюгонио [131]. Задавая или измеряя скорость ударной волны в мишени и скорость подлета ударника  $w$ , можно найти  $u$  из уравнения [131]:

$$f(w - u) = \frac{Du}{V_0}.$$

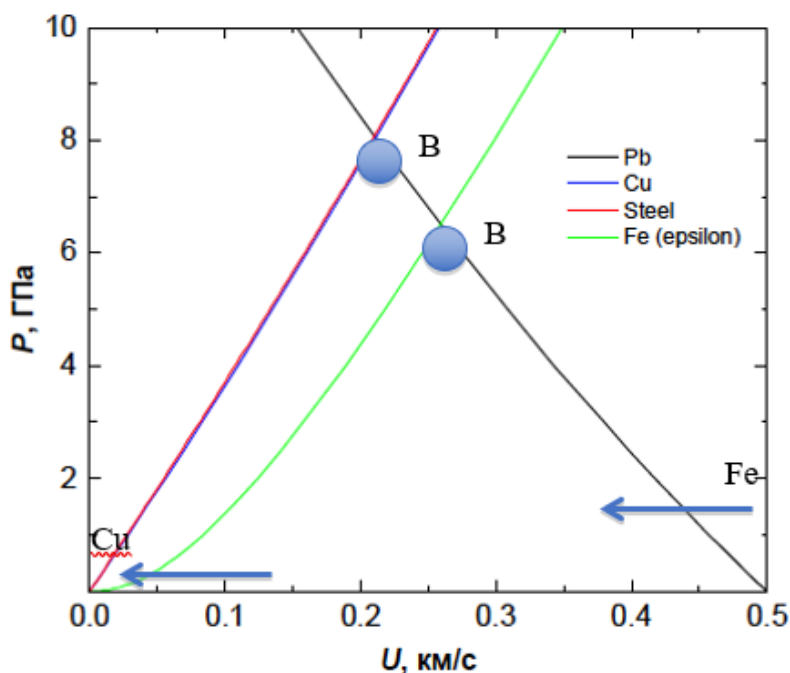
Таким образом, зная уравнения состояния ударника и мишени по этой формуле легко найти скорость  $u$  и давление  $P$ .

Рассмотрим столкновение ударника и мишени с помощью диаграммы  $p, u$  (см. **Фиг.7.4**), где  $u$ - массовая скорость вещества в лабораторной системе координат, в которой мишень изначально покоится. Начальные состояния мишени  $M$  на **Фиг.7.4** ( $p=0, u=0$ ) и летящего ударника  $U$  ( $p=0, u=w$ ) изображаются точками  $O$  и  $A$  соответственно. Если измеренная скорость ударной волны мишени есть  $D$ , то геометрическим местом состояний вещества

мишени в ударной волне служит прямая «волновой луч» [131]  $p = \frac{Du}{V_0}$  с известным наклоном  $D/V_0$ . Изобразим ударную адиабату вещества ударника в виде зависимости давления от скачка скорости, равного в данном случае  $w-u$ :

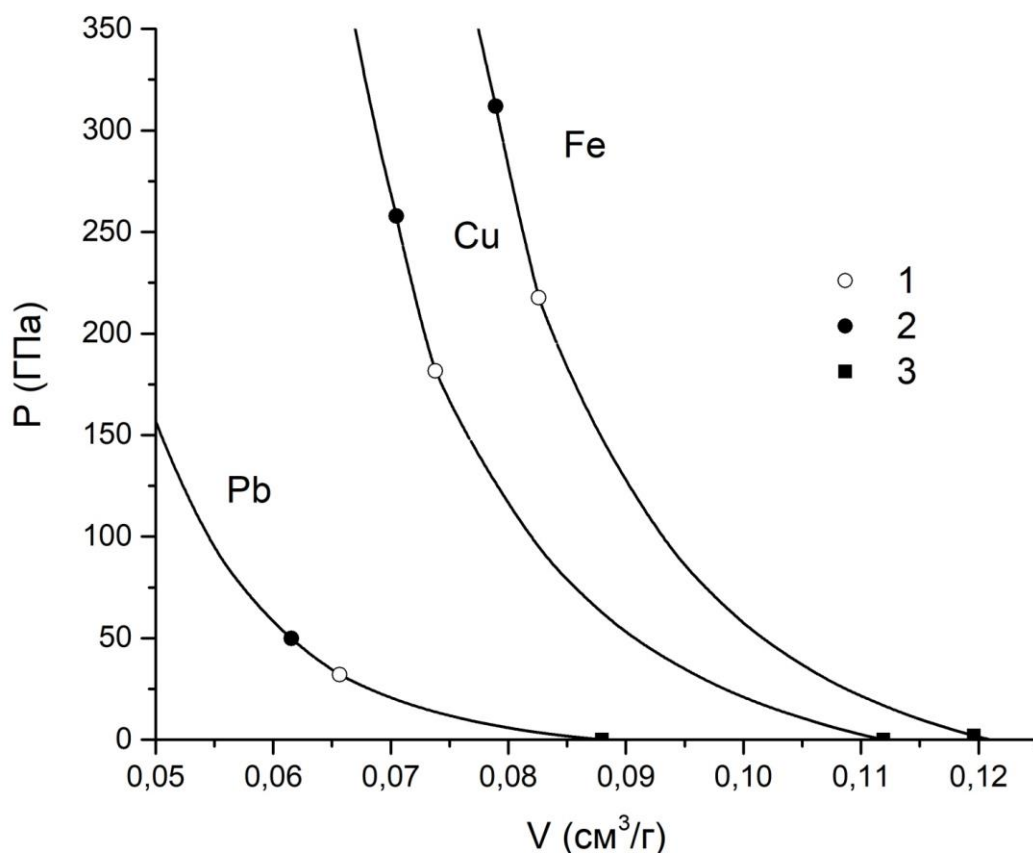
$p_y = f_y(w-u)$ . Точка пересечения В обеих линий согласно уравнению  $p = \frac{Du}{V_0}$  определяет состояние (давление и массовую скорость) в обеих ударных волнах- в ударнике и мишени.

На **Фиг.7.5** приведены результаты расчетов такого рода автомодельных течений с учетом полуэмпирических УСР (см. Главу 5) в виде полуэмпирических зависимостей скорости фронта ударной волны  $D$  от массовой скорости  $u$  ударно- сжатого вещества:  $D = a + bu$  (см. Главу 5).



**Фиг.7.5** Параметры автомодельных течений металлов рассматриваемой задачи, найденные с учетом полуэмпирических УСР

Видно, что возникающие амплитудные давления в точках В ударно-сжатого вещества находятся на уровне 80 тысяч атмосфер. На **Фиг.7.5** линиями со стрелками отмечены значительно более низкие динамические пределы текучести железа  $S_{Fe}^*$ ,  $S_{Cu}$  и  $S_{Pb}^*$ . Отметим, что эти значения динамических пределов упругости будут еще более снижены из-за эффекта разогрева металлов в ударной волне [204] и приближения состояний ударно-сжатого Cu и Fe к границам плавления.

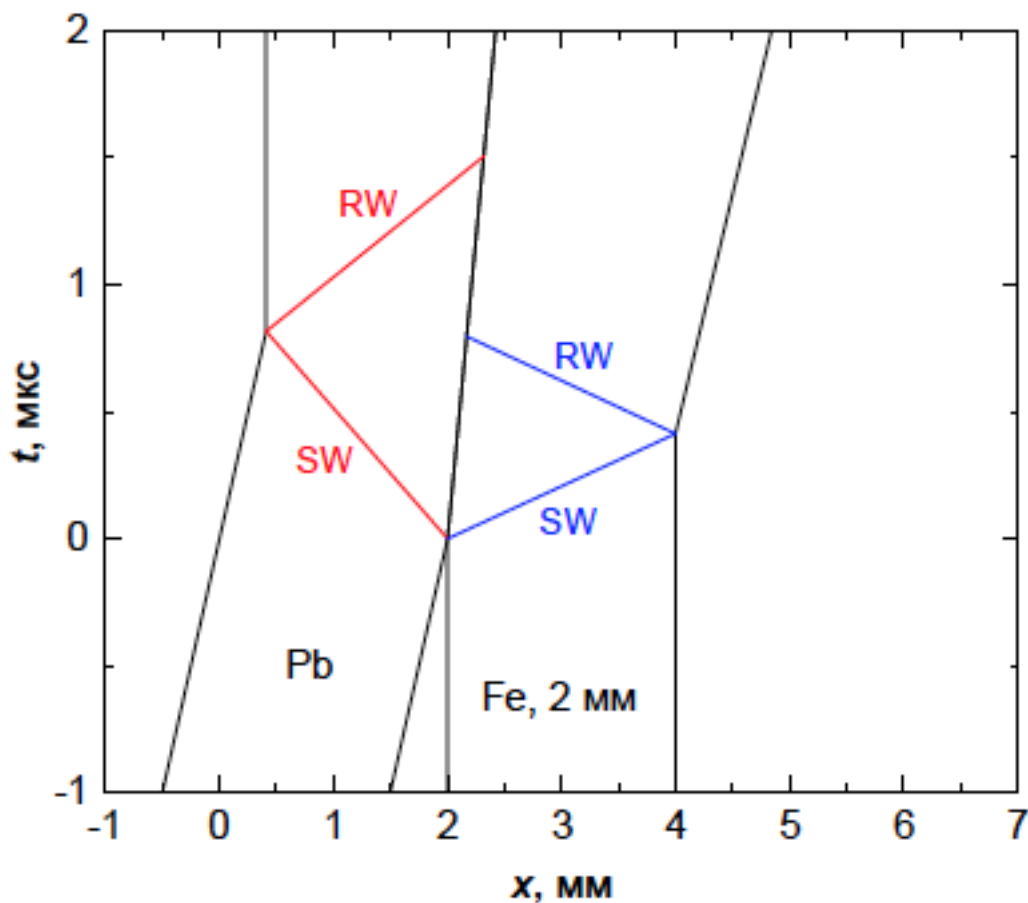


**Фиг.7.6** Состояния на ударной адиабате металлов. 1, 2- начало и конец плавления, 3- величины динамических пределов упругости [204]. Плавление при ударном сжатии- ударные адиабаты Pb, Cu, Fe (1 – начало, 2 – конец плавления, 3 – предел упругости)

Термодинамический анализ с использованием полуэмпирических уравнений состояний Главы 5 показывает [205], что давления ударного сжатия, при котором начинается плавление железа и свинца относятся к мегабарному диапазону, значительно превосходящему давления ударного сжатия в опытах [196,197]. В тоже время рассмотренные нами давления (см. **Фиг.7.5**) значительно превосходят соответствующие динамические пределы упругости  $S^*$  [197]. Таким образом, приведенные аргументы оправдывают неучет прочностных эффектов и применение для описания возникающих течений уравнений идеальной жидкости (Эйлера).

Рассмотрим теперь более детально кинематику процессов соударения, используя автомодельные решения (**Фиг.7.3**) из [131]. Подчеркнем, что эти

автомодельные решения применимы в ограниченной области- только до пересечения ударных волн и волн разгрузки [131].



Фиг.7.7 X-t диаграмма удара Pb о Cu

На Фиг.7.7 приведены результаты одномерного расчета задачи о плоском ударе [206,207], полученные методом индивидуальных частиц (см. подробнее [206,207]) с использованием полуэмпирических уравнений состояния (см. Глава 6).

Обращает на себя внимание возникновение динамического «откола» [204]- нарушения сплошности металлов в мощных растягивающих волнах разгрузки. Расчеты показывают, что на контактной границе металлов реализуются значительные (до  $10^7 - 10^8 g$ ) ускорения, уступающие лишь тем, что имеют место в опытах по лазерному управляемому термоядерному синтезу с инерционным удержанием горячей плазмы ( $\frac{du}{dt} \gg 10^{13} - 10^{14} g$ ). Существенно так же, что в опытах [197] ускорение контактной границы

направлено от высокоплотного вещества к низкоплотному, что благоприятно для развития неустойчивости Рэля-Тейлора [127].

Мы видим, что реальные условия эксперимента [197] характеризуются весьма сложной картиной течения из-за конечных толщин ударника и мишени. Начальная стадия процесса течения (до пересечения ударных волн и волн разгрузки), допускающая применение автомодельных решений уравнений гидродинамики представлена на **Фиг.7.7**, где видна реальная картина движения и взаимодействия ударных и Римановских волн.

### **7.3 3D-моделирование высокоскоростного соударения двух металлических пластин**

Ниже представлены результаты численного моделирования высокоскоростного удара и развития начальной стадии неустойчивости контактной границы соударяющихся металлических пластин. [208-214] Математическая модель основывается на системе уравнений Эйлера для среды, описываемой полуэмпирическим уравнением состояния (см. Главу 5). Параметры уравнения состояния откалиброваны по расчетно-экспериментальным данным, основанным на реальных широкодиапазонных уравнениях состояния металлов из Главы 6.

Вычислительный алгоритм решения уравнений газовой динамики основан на схемах Годунова [10] и Harten-Lax-van Leer [110]. В результате численных экспериментов было замечено, что первый порядок может сглаживать важные для нас кратерообразные выплески на контактной границе, в связи с чем порядок аппроксимации метода HLL был повышен до второго.

В расчетах было установлено, что начальное синусоидальное возмущение контактной границы между пластинами после прохождения волн разрежения от свободных границ пластин приобретает круговую кратерообразную форму, что соответствует результатам натуральных опытов [197] (см. **Фиг. 7.1**)

Отметим основные особенности эксперимента [197]:

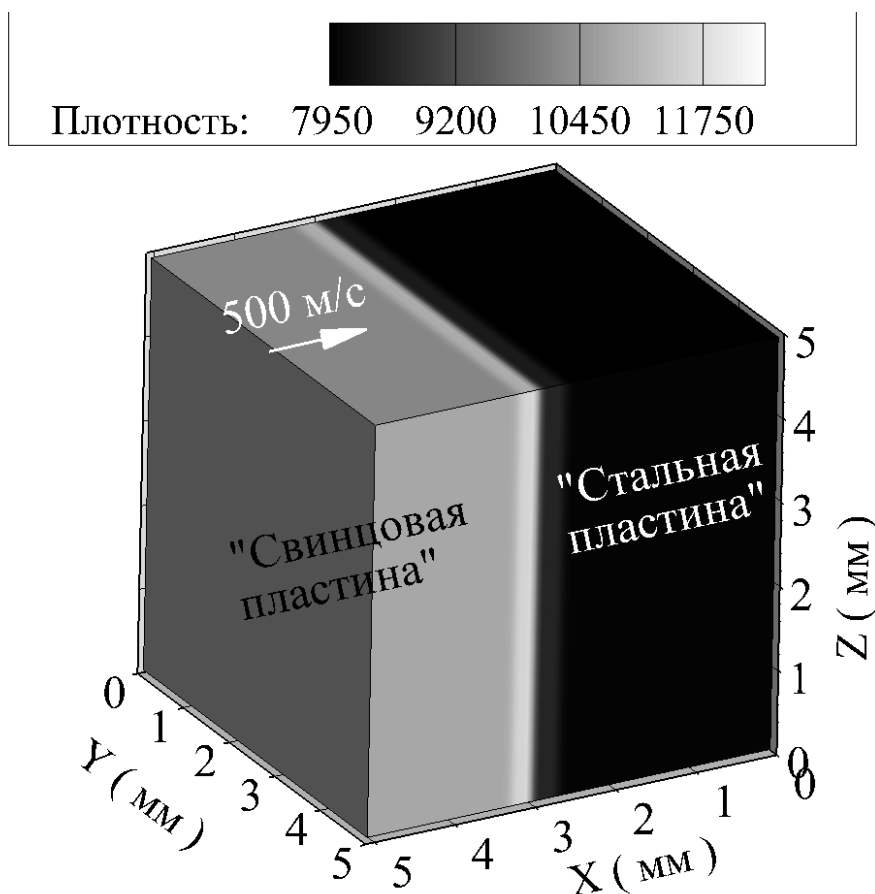
1. Развитие неустойчивости на границе раздела при соударении пластин характеризуется кольцеобразными выплесками металла из стальной пластины в сторону свинцовой.



2. Размер толщины стальной пластины и наличие возмущений на ее поверхности слабо влияет на рост неустойчивости на границе раздела пластин при сохранении толщины свинцовой пластины.
3. Увеличение толщины свинцовой пластины при сохранении скорости метания стальной пластины приводит к увеличению длины волны выплеска на границе соударения.

### 7.3.1 Постановка задачи

Ориентируясь на эксперимент [197] рассматривается высокоскоростное взаимодействие свинцовой и стальной пластин (см. **Фиг. 7.8**). Свинцовая пластина плотностью  $11\,300\text{ кг/м}^3$  налетает на покоящуюся стальную плотностью  $7\,900\text{ кг/м}^3$  со скоростью  $500\text{ м/с}$ . В соответствии с разделом 7.2 предполагается, что в течение времени порядка  $10\text{ мкс}$  металлы ведут себя как псевдожидкости [197], описываемые уравнениями газовой динамики.



**Фиг. 7.8** Постановка задачи о высокоскоростном ударе, момент времени  $0.1\text{ мкс}$  после соударения, шкала в  $\text{кг/м}^3$

На поверхностях, параллельных разделу сред, заданы граничные условия втекания. До прихода на границу УВ задаются параметры втекания с начальными характеристиками свинцовой и стальной пластин. В момент прихода УВ на границу параметры втекания меняются таким образом, чтобы обеспечить формирование волн разрежения, распространяющихся внутрь расчетной области. Данные параметры подбирались из анализа (p-u) – диаграмм [204] (см. **Фиг.7.2, Фиг.7.4**), описывающих решение задачи о распаде произвольного разрыва на «свободных» границах пластин [204,131]. На остальных границах устанавливаются периодические граничные условия.

Плоскость X = 0 мм		Плоскость X = 5 мм	
$t \leq 0.88$ мкс	$t > 0.88$ мкс	$t \leq 0.92$ мкс	$t > 0.92$ мкс
$\rho_{in}^1 = 7900$ кг/м <sup>3</sup>	$\rho_{in}^2 = 7900$ кг/м <sup>3</sup>	$\rho_{in}^1 = 11300$ кг/м <sup>3</sup>	$\rho_{in}^2 = 11300$ кг/м <sup>3</sup>
$u_{in}^1 = v_{in}^1 = w_{in}^1 = 0$ м/с	$u_{in}^2 = -544.8$ м/с	$u_{in}^1 = -500$ м/с	$u_{in}^2 = -45$ м/с
$p_{in}^1 = 10^5$ Па	$v_{in}^2 = w_{in}^2 = 0$ м/с	$v_{in}^1 = w_{in}^1 = 0$ м/с	$v_{in}^2 = w_{in}^2 = 0$ м/с
	$p_{in}^2 = 10^5$ Па	$p_{in}^1 = 10^5$ Па	$p_{in}^2 = 10^5$ Па

**Таб. 7.1** Начальные и граничные условия для задачи о соударении металлических пластин

В некоторый момент времени после формирования УВ задается искривление контактной границы между пластинами в сторону более тяжелой пластины, имеющее осесимметричную синусоидальную форму. В качестве ориентира для выбора размеров возмущения был взят линейный размер возмущения формы 1 мм при толщине покоящейся пластины 4.68 мм и толщине метаемой 3.9 мм [203]. Форма возмущения плоской контактной границы  $s(x, y) = 0$  определяется соотношениями:

$$d(y, z) = A \cdot \sin(y') \cdot \sin(z'), \quad y' = \frac{\pi}{B} |y - y_0| + \frac{\pi}{2}, \quad z' = \frac{\pi}{B} |y - z_0| + \frac{\pi}{2},$$

где  $(y_0, z_0)$  – координаты центров пластин,  $A$  – амплитуда возмущения, высота «купола».

### 7.3.2 Математическая модель

Математическая модель основывается на трехмерной системе уравнений Эйлера для среды с полуэмпирическим УРС (см. Главу 5) записанной в декартовой системе координат  $(x, y, z)$ :

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}_x(\mathbf{U}) + \mathbf{G}_y(\mathbf{U}) + \mathbf{H}_z(\mathbf{U}) = \mathbf{0},$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (E + p)u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (E + p)v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w^2 + p \\ (E + p)w \end{bmatrix},$$

$$E = \frac{\rho}{2}(u^2 + v^2 + w^2) + \rho \varepsilon(p, \rho), \quad \varepsilon(p, \rho) = \frac{p + \gamma p_0}{\rho(\gamma - 1)}. \quad (7.2)$$

Здесь  $\rho, u, v, w, E, p, \varepsilon, \gamma$  – плотность, три компоненты скорости, полная энергия на единицу объема среды, давление, удельная внутренняя энергия и показатель адиабаты газа,  $\mathbf{U}$  – вектор консервативных переменных, а  $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ ,  $\mathbf{G}(\mathbf{U})$  и  $\mathbf{H}(\mathbf{U})$  – векторы потоков вдоль осей  $x, y$  и  $z$ , соответственно.

Как мы отмечали, параметры полуэмпирического УРС были откалиброваны по расчетно-экспериментальным данным для того, чтобы обеспечить количественно разумные параметры УВ, которые образуются при соударении. Процесс подбора констант УРС изложен ниже.

### 7.3.3 Вычислительный алгоритм

Для проведения вычислительных экспериментов применяется метод расщепления по пространственным переменным. На каждом шаге по времени для каждого из трех пространственных направлений выполняется следующий алгоритм: поочередно из расчетной области выбираются одномерные слои, в каждом слое применяется одномерный метод Harten-Lax-van Leer (HLL) [110], переменные обновляются, после чего полученные значения переменных становятся входными для расчета в другом направлении:

$$\mathbf{U}_{i,j,k}^{n+1} = L_z L_y L_x \mathbf{U}_{i,j,k}^n.$$

Здесь  $i$ ,  $j$  и  $k$  – пространственные индексы ячеек структурированной расчетной сетки вдоль координатных направлений  $x$ ,  $y$  и  $z$ , соответственно;  $n$  – временной индекс;  $L_x$ ,  $L_y$  и  $L_z$  – одномерные операторы разностной схемы в процедуре расщепления. Обозначим шаг расчетной сетки вдоль координатных направлений через  $h_x$ ,  $h_y$  и  $h_z$ .

Опишем в качестве примера действие оператора  $L_x$ . Используется следующая конечно-объемная аппроксимация и явная схема Эйлера интегрирования по времени:

$$\frac{\tilde{\mathbf{U}}_{i,j,k}^{n+1} - \mathbf{U}_{i,j,k}^n}{\Delta t^n} + \frac{\mathbf{F}_{i+1/2,j,k}^{\text{HLL}} - \mathbf{F}_{i-1/2,j,k}^{\text{HLL}}}{h_x} = 0, \quad (7.3)$$

$$\mathbf{F}_{i+1/2,j,k}^{\text{HLL}} = \frac{S_{i+1/2,j,k}^+ \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i,j,k}^n) - S_{i+1/2,j,k}^- \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1,j,k}^n) + S_{i+1/2,j,k}^+ S_{i+1/2,j,k}^- (\mathbf{U}_{i+1,j,k}^n - \mathbf{U}_{i,j,k}^n)}{S_{i+1/2,j,k}^+ - S_{i+1/2,j,k}^-},$$

$$S_{i+1/2,j,k}^+ = \max(u_{i,j,k}^n + c_{i,j,k}^n, u_{i+1,j,k}^n + c_{i+1,j,k}^n, 0), \quad S_{i+1/2,j,k}^- = \min(u_{i,j,k}^n - c_{i,j,k}^n, u_{i+1,j,k}^n - c_{i+1,j,k}^n, 0). \quad (7.4)$$

Шаг интегрирования по времени  $\Delta t^n$  выбирается динамически для выполнения условия устойчивости. Для двучленного УРС (7.2) скорость звука  $c$  задается выражением:

$$c = \sqrt{g \frac{p + p_0}{r}}.$$

где  $P_0$  – кривая «холодного» сжатия – изотерма  $T=0^0\text{K}$ . Стоит обратить внимание, что численный поток в схеме HLL зависит только от скорости звука и не зависит от конкретного вида УРС среды, что делает данный метод привлекательным для моделирования течений сред со сложными УРС, в том числе заданными в табличном виде. Тильда над вектором переменных в (7.3) означает, что это не переменные на следующем временном шаге, а вектор входных данных для следующего этапа процедуры расщепления по пространственным направлениям.

Второй порядок аппроксимации был достигнут с помощью кусочно-линейного восполнения сеточных функций консервативных переменных с использованием ограничителя  $\text{minmod}$  [59,12]:

$$\mathbf{U}_{i,j,k}^{n+} = \mathbf{U}_{i,j,k}^n + \frac{h_x}{2} \left[ \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right]_{i,j,k}^n, \quad \mathbf{U}_{i+1,j,k}^{n-} = \mathbf{U}_{i+1,j,k}^n - \frac{h_x}{2} \left[ \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right]_{i+1,j,k}^n,$$

$$\left[ \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right]_{i,j,k}^n = \text{minmod} \left( \frac{\mathbf{U}_{i+1,j,k}^n - \mathbf{U}_{i,j,k}^n}{h_x}, \frac{\mathbf{U}_{i,j,k}^n - \mathbf{U}_{i-1,j,k}^n}{h_x} \right),$$

$$\text{minmod}(a, b) = \frac{1}{2} (\text{sign}a + \text{sign}b) \min(|a|, |b|).$$

Для вектора функция  $\text{minmod}$  применяется покомпонентно. Численный поток HLL (7.4) тогда модифицируется следующим образом:

$$\mathbf{F}_{i+1/2,j,k}^{\text{HLL}} = \frac{S_{i+1/2,j,k}^+ \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i,j,k}^{n+}) - S_{i+1/2,j,k}^- \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1,j,k}^{n-}) + S_{i+1/2,j,k}^+ S_{i+1/2,j,k}^- (\mathbf{U}_{i+1,j,k}^{n+} - \mathbf{U}_{i,j,k}^{n-})}{S_{i+1/2,j,k}^+ - S_{i+1/2,j,k}^-},$$

$$S_{i+1/2,j,k}^+ = \max(u_{i,j,k}^{n+} + c_{i,j,k}^{n+}, u_{i+1,j,k}^{n-} + c_{i+1,j,k}^{n-}, 0),$$

$$S_{i+1/2,j,k}^- = \min(u_{i,j,k}^{n+} - c_{i,j,k}^{n+}, u_{i+1,j,k}^{n-} - c_{i+1,j,k}^{n-}, 0).$$

### 7.3.4 Калибровка параметров УРС и граничных условий

Для воспроизведения количественных характеристик процесса взаимодействия металлических пластин требуется откалибровать константы  $\gamma$  и  $P_0$  в полуэмпирическом УРС (7.2) (см. Главу 5). Данные константы калибровались по характеристикам образовавшихся при соударении УВ с использованием расчетно-экспериментальных данных [215,216]. Для найденных значений  $\gamma$  и  $P_0$ :  $\gamma = 3.0$ ,  $P_0 = 25$  ГПа получено удовлетворительное соответствие (по всем величинам максимальное отклонение не более 30%), позволяющее использовать данный набор параметров УРС для дальнейших расчетов.

Верификация реализованного метода проводилась на трех тестах, приведенных в статье [217]. Расчетная область – отрезок  $[0;1]$ . Расчетная сетка – равномерная с числом ячеек 100. В начальный момент времени по всей расчетной области задаются одинаковые параметры, представленные в **Таб.7.** На левой границе выставляется условие непротекания, на правой – условие втекания с параметрами, равными начальным условиям. Во всех тестах начальная скорость среды направлена в сторону стенки. Таким образом, происходит отражение от стенки с формированием отошедшей УВ. Среда описывается полуэмпирическим уравнением состояния (7.2) с константами:

$$\gamma = \frac{5}{3}, c_0 = 1, \rho_0 = \rho(t=0).$$

	$t$	$P$	$\rho$	$u$	$\gamma$
Тест №1	0.344	0	1	-1	5/3
Тест №2	0.295	0.224			
Тест №3	0.130	3.303			

*Таб.7.2 – Постановка верификационных тестов из [217]. Все параметры приведены в безразмерном виде*

Во втором столбце **Таб.7.2** указан момент времени, в который анализируются профили плотности и давления в тесте.

Построим точные решения для данных тестов. Найдем величины плотности и давления среды за отраженной от стенки УВ. Для этого используем уравнения из [202]. Уравнение адиабаты Гюгонио:

$$R = \rho \frac{(\gamma+1)(P+p_0) + (\gamma-1)(p+p_0)}{(\gamma-1)(P+p_0) + (\gamma+1)(p+p_0)}, \quad (7.5)$$

где  $P$  – давление за фронтом УВ,  $R$  – плотность за фронтом УВ, а  $p_0 = c_0^2 \rho_0$ . Соотношения для правой УВ:

$$U - u - \frac{P-p}{a} = 0, \quad a = \sqrt{\rho \left( \frac{\gamma+1}{2}(P+p_0) + \frac{\gamma-1}{2}(p+p_0) \right)}. \quad (7.6)$$

где  $U$  – скорость за фронтом УВ,  $a$  – массовая скорость.

Теперь для каждого теста из **Таб.7.2** аналитически получим значения параметров газа за УВ, подставляя параметры перед УВ в уравнения (7.5), (7.6). Кроме того, аналитически можно вычислить скорость УВ и ее положение на указанный момент времени, исходя из следующих формул:

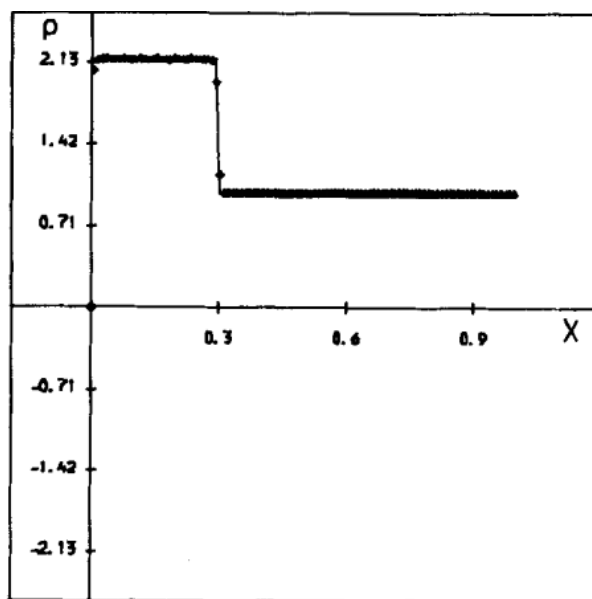
$$D = \frac{[\rho u]}{[\rho]} = \frac{RU - \rho u}{R - \rho} = \frac{0 - 1 \cdot (-1)}{1 - 1} = \frac{1}{R - 1}, \quad \Delta x = t \cdot D.$$

Вычисленные элементы аналитического решения приведены в **Таб.7.3**

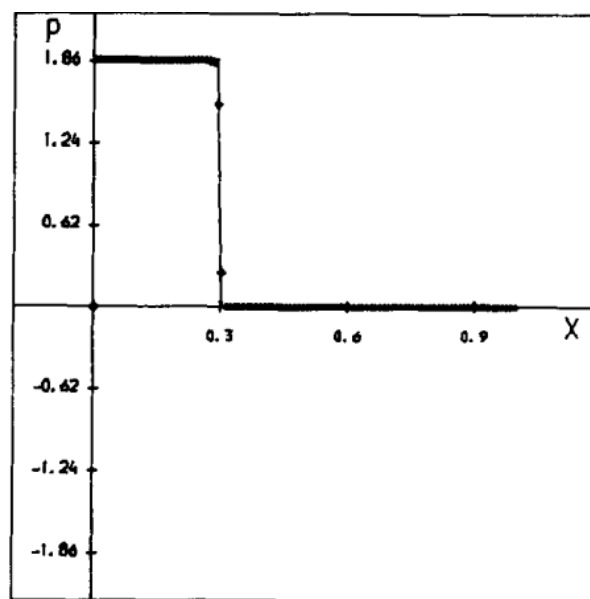
	$R$	$U$	$P$	$D$	$\Delta x$
Тест №1	2.15	0	1.87	0.87	0.299
Тест №2	1.99		2.24	1.01	0.298
Тест №3	1.43		6.606	2.33	0.303

*Таб. 7.3 – Параметры газа за отраженной УВ, а также ее скорость и положение на рассматриваемый момент времени, вычисленные аналитически*

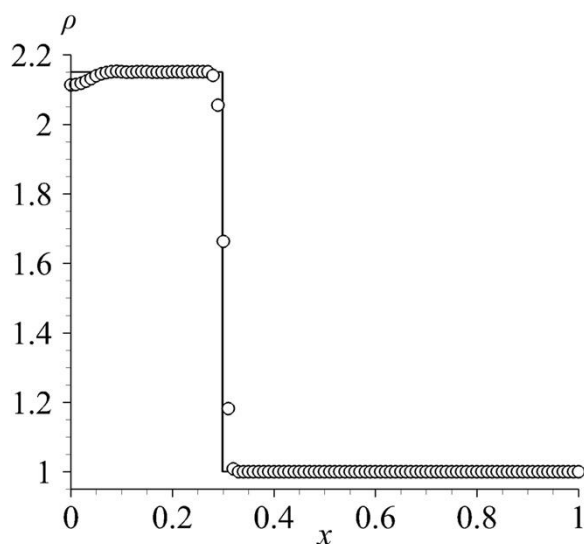
На **Фиг.7.9** приведены вычисленные профили давления и плотности во всех тестах в сравнении с построенными аналитическими решениями, а также расчетными результатами из оригинальной работы [84]. В [84] расчеты проводились методом Роу второго порядка аппроксимации, построению которого для среды со сложным УРС и была посвящена статья. На всех графиках наблюдается соответствие по давлению и плотности за отраженной УВ между расчетными и аналитическими данными. В расчетах [84] численное «размазывание» УВ не превышает двух расчетных ячеек, в рамках данной работы – трех, что типично для схем второго порядка аппроксимации. Большее «размазывание» УВ на **Фиг.7.9 в, г** связано с тем, что используемый в данной работе метод HLL является более диссипативным, чем метод Роу.



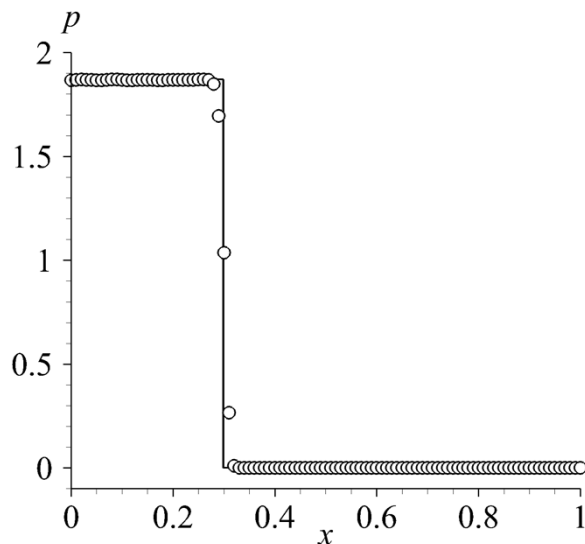
(a)



(б)



(в)



(г)

**Фиг.7.9** – Результаты расчета теста № 1, см. Таб. 7.4: (а), (б) – расчеты из [84], (в), (г) – расчеты автора (круги) и точное решение (сплошная линия)

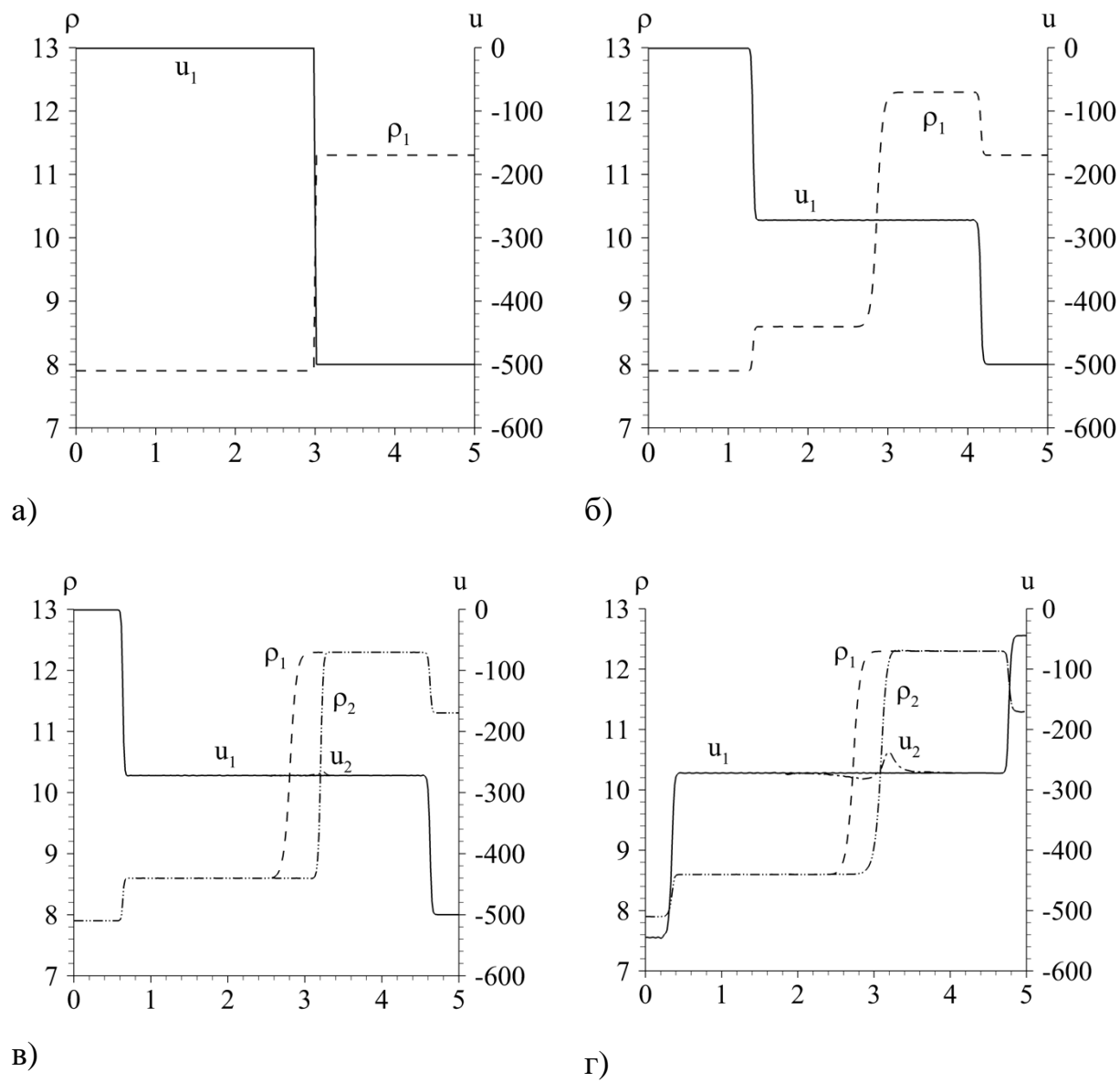
### 7.3.5 Результаты вычислительных экспериментов

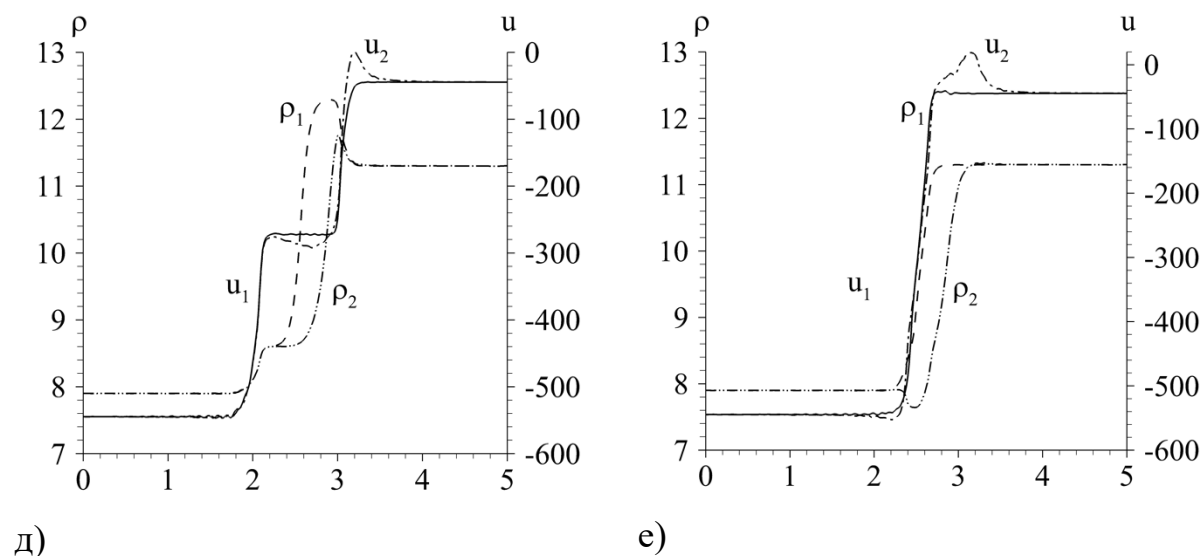
Форма возмущения описывалась значениями параметров  $A = 0.633$  мм и  $B = 1.24$  мм (см. раздел 7.3.1). Напомним, что возмущение формы происходило уже после того, как ударные волны разошлись на достаточное расстояние, чтобы возмущение формы не осуществлялось в области распространения



фронта УВ в данный момент. Расчеты проводились на сетке  $300 \times 121 \times 121$ . Вдоль каждого из координатных направлений сетка была равномерной.

Рассмотрим сначала динамику процесса на одномерных распределениях вдоль выделенных направлений, параллельных оси  $x$ , см. **Фиг.7.10**.





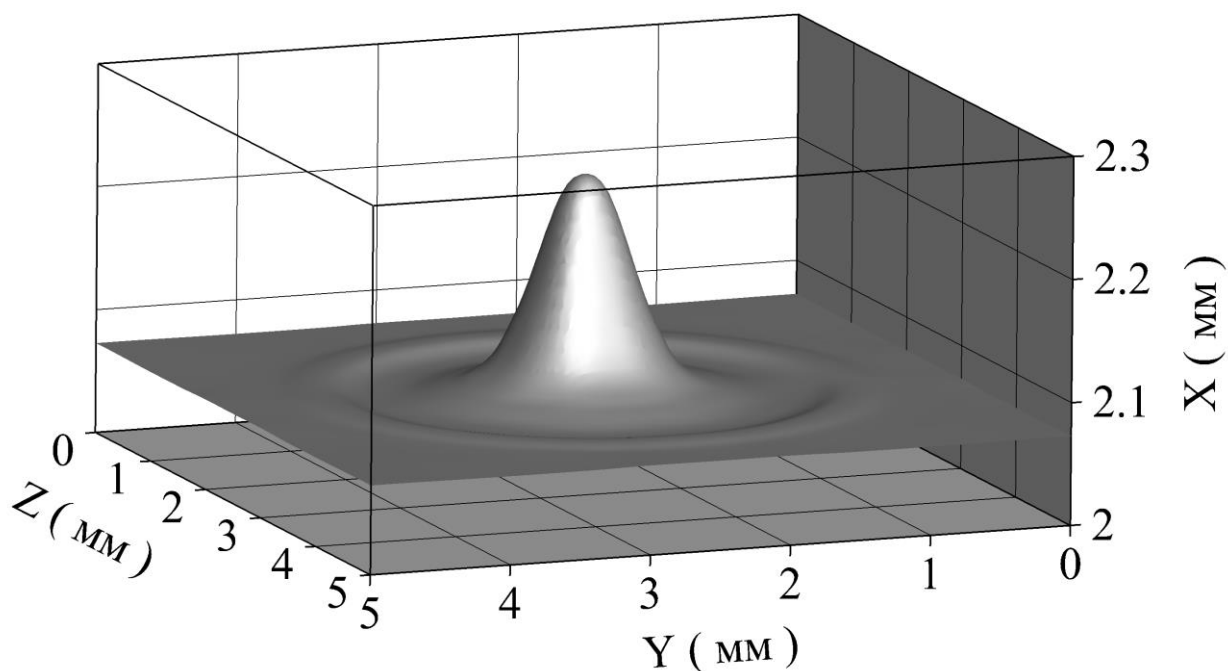
д)

е)

**Фиг.7.10** Начальное возмущение выпукло в сторону свинца. Распределение плотности (пунктирные и пунктирные с двумя точками линии, левая ось ординат) и  $x$ -компоненты скорости (сплошная и пунктирные с одной точкой линии, правая ось ординат) в двух срезах: вдоль границы, вдали от возмущения (первое направление, индекс 1) и в центре симметрии пластин (второе направление, индекс 2). Оси абсцисс – в мм, левая ось ординат – в  $10^3 \text{ кг/м}^3$ , правая ось ординат – в м/с

Первое направление (индекс 1 на **Фиг.7.10**) проходит вдалеке от начального возмущения и, фактически, описывает решение соответствующей одномерной задачи. Второе – через геометрический центр возмущения (индекс 2 на **Фиг.7.10**).

Для визуализации структур в окрестности контактной границы были проанализированы изоповерхности плотности, давления и продольной компоненты скорости.



*Фиг.7.11* Изоповерхность плотности  $7\ 200\ \text{кг/м}^3$  в момент времени 2.3 мкс после начала соударения. Начальное возмущение – выпуклость в сторону свинца (сверху)

**Фиг.7.11** иллюстрирует изоповерхность плотности в окрестности контактной границы между металлами. Начальное возмущение контактной границы приобретает кратерообразную форму, качественно соответствующую наблюдаемым структурам в опытах [197].

#### 7.4 Выводы

1. Разработана модель для расчета высокоскоростного соударения металлических пластин с использованием трехмерных уравнений Эйлера для среды с полуэмпирическим уравнением состояния.
2. Разработан вычислительный алгоритм на основе метода HLL второго порядка аппроксимации по пространственным переменным на гладких решениях для решения определяющей системы уравнений. Алгоритм верифицирован на тестах о формировании отраженной от непроницаемой стенки ударной волны в среде, подчиняющейся двучленному уравнению состояния.

3. Разработан соответствующий программный комплекс для численного интегрирования трехмерных уравнений Эйлера для среды с двучленным уравнением состояния с использованием метода HLL.
4. Проведена калибровка параметров уравнения состояния на задаче о соударении металлических пластин с использованием расчетно-экспериментальных данных сотрудников ОИВТ РАН и ИПХФ РАН на задаче о соударении металлических пластин с использованием расчетно-экспериментальных данных.
5. Проведено параметрическое численное исследование задачи высокоскоростного соударения металлических пластин.
6. Получены структуры, типичные для развития начальной стадии неустойчивости Рэля-Тейлора, а также сходные с наблюдавшимися в натуральных экспериментах [197]. Исследованы две формы начального возмущения – выпуклость в сторону свинца и выпуклость в сторону стали. Получены картины течения после прохождения ВР от свободных границ пластин через контактный разрыв. Получены структуры, типичные для развития начальной стадии неустойчивости Рэля-Тейлора (грибовидные), а также сходные с наблюдавшимися в натуральных экспериментах [197] (кратерообразные выплески). По-видимому, для получения более явного эффекта требуется моделирование на больших временах, учитывать многократное прохождение волн разрежения через контактную границу пластин.

Результаты, представленные в данной работе, частично опубликованы в [84].

## ГЛАВА 8. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С МЕТАЛЛАМИ

Восьмая глава посвящена численному моделированию процессов, происходящих при воздействии фемтосекундного лазерного излучения на тонкую металлическую пленку, расположенную на стеклянной подложке.

Численное моделирование взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с тонкими металлическими пленками проведено с использованием пакета прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**.

При работе над данным разделом диссертации использованы следующие публикации автора, в которых, согласно Положению о присуждении ученых степеней в МГУ, отражены основные результаты, положения и выводы исследования:

- Шепелев В.В., Фортова С.В., Опарина Е.И., Использование программного комплекса Turbulence Problem Solver (TPS) для численного моделирования взаимодействия лазерного излучения с металлами // Компьютерные исследования и моделирование. – 2018, том 10, № 5, с. 619-630.
- Shepelev V.V., Inogamov N.A., Fortova S.V., Danilov P.A., Kudryashov S.I., Kuchmizhak A.A., Vitrik O.B., Action of a femtosecond laser pulse on thin metal film supported by glass substrate // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 1128, 012092.
- Shepelev V.V., Inogamov N.A., Fortova S.V., Thermal and dynamic effects of laser irradiation of thin metal films // Optical and Quantum Electronics. – 2020, vol. 52(2), 88.

### 8.1 Введение

В настоящее время важным направлением развития промышленных лазерных технологий является нано структурирование поверхностей с помощью короткоимпульсных лазеров (см. [218,220] и содержащиеся там ссылки). По способу лазерного воздействия и по виду образовавшихся структур в настоящее время выделено несколько типов наноструктурирования [220], из которых наибольшее практическое применение получили структуры ЛИППС- лазерно- индуцированные периодические поверхностные структуры, случайные структуры, одиночные образования и т. п.

К настоящему времени выполнено множество экспериментальных и теоретических работ по лазерному облучению ультракороткими импульсами

тонких металлических пленок на диэлектрических подложках [220-238]. Активные исследования в этой теме мотивированы важными технологическими приложениями в нанoeлектронике, плазмонике, сенсорике и в производстве метаструктур [238-243]. Действие лазеров в данном случае превращает изначально гладкую поверхность в наноструктурированную с заданными параметрами и свойствами [220-242].

При рассмотрении данных процессов обычно считается (см. [218,220] и содержащиеся там ссылки), что если толщина пленки меньше, чем ширина зоны прогрева  $d_T$ , то они называются «тонкими» (для золота  $d_T \approx 150_{\text{нм}}$ ). Их динамика, последующее затвердевание и образующиеся структуры, качественно отличаются от тех, которые соответствуют «толстым» мишеням большей толщины (см. [218,220] и содержащиеся там ссылки). Одномерная (1D) динамика таких мишеней исследована в работах [244-252]. В настоящей главе рассматриваются процессы, происходящие в «тонких» пленках.

Тонкие пленки на диэлектрических подложках – важный класс технологических мишеней для наномодификации поверхностей в плазмонике и в ряде ответственных сенсорных приложениях [218,220]. Физические и газодинамические процессы при воздействии мощных сверхкоротких лазерных импульсов на металлические мишени крайне сложны ввиду трудностей диагностики сверхбыстрых процессов, а также ввиду сложной и разнообразной газодинамики этого нестационарного нелинейного явления. Данной тематике посвящено много статей [218,220,253-258], которые концентрируются на динамике самой металлической пленки, уделяя меньшее внимание диэлектрической подложке. В большинстве работ подложка рассматривается как объект, поглощающий только первую волну сжатия, что является, как показано в [259], чрезмерным упрощением.

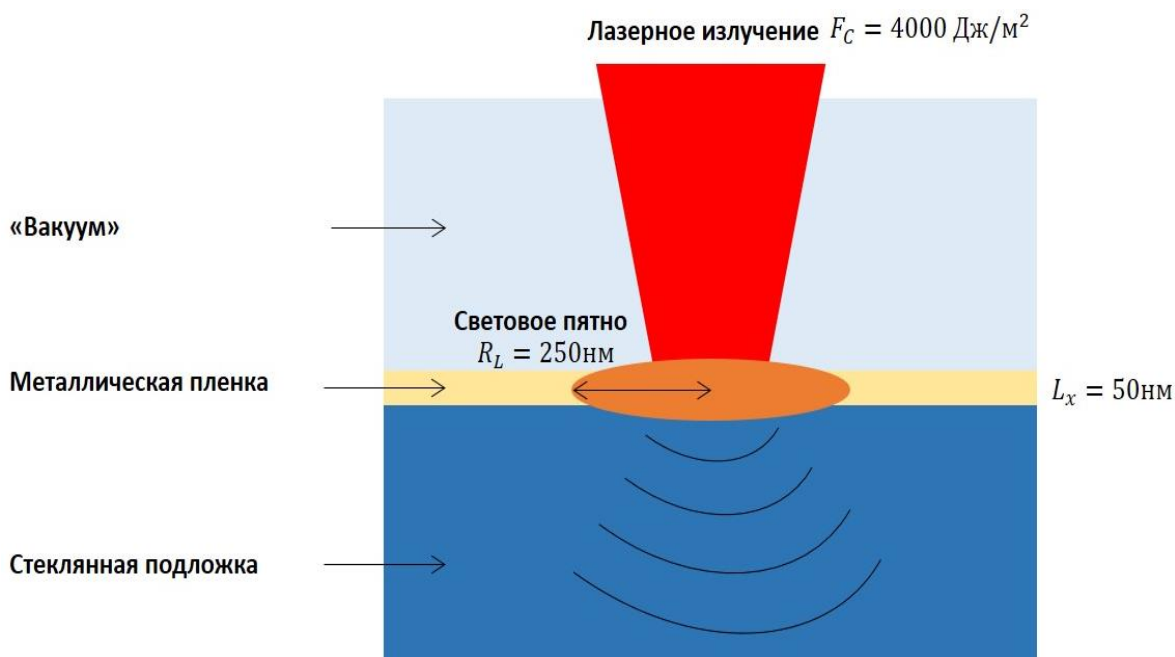
Вместе с тем, экспериментальные работы [220-227,229,231,244], посвященные задачам с пленками, нанесенными на диэлектрические подложки, ввиду трудностей диагностики не позволяют отслеживать изменения в подложке, а теоретические и вычислительные работы [227-231,233-238,242] ориентируются в основном на исследование динамики только самой металлической пленки. Нас же здесь будет интересовать процессы сепарации тонкой металлической пленки от диэлектрической подложки с учетом влияния двумерных ударно-волновых процессов, происходящих в подложке. Для этого мы используем допущение, что пленка и подложка взаимодействуют в течение так называемого «акустического» времени [234-236]  $t_s = d_f/c_s \approx 10ps$ , за которое возмущение проходит через

пленку. Это позволяет описывать процессы взаимодействия пленки и подложки с помощью относительно быстрого (по сравнению с расчетами методом молекулярной динамики) одномерного двух- температурного (1D 2Т-НД) кода [234-236]. Отметим, что в случае ультракоротких лазерных импульсов значимой становится 2Т-стадия, когда существенно необходимой является разница между температурами электронной и ионной подсистем металла [260]. В результате этой стадии, которая длится порядка 1-10  $ps$ , в металле образуется прогретый слой толщиной порядка десятков нм, который влияет на образование поверхностных структур.

Среди вычислительных работ большинство посвящены молекулярно-динамическому моделированию [229-238], или одномерному гидродинамическому моделированию [234,235,261], что затрудняет во многих случаях получить адекватное и содержательное описание сложных многомерных нестационарных явлений.

В данной главе представлены двумерные численные исследования, минуя 2Т стадию и акцентируя внимание на динамике подложки, которая, как показывают опыты, имеет определяющее значение в технологическом процессе [262,263]. [264,265]

Схема численного эксперимента приведена на **Фиг.8.1**.



**Фиг.8.1** Схема численного эксперимента

Тонкая золотая пленка толщиной  $d_f = 50 \text{ нм}$  закреплена на толстой стеклянной подложке (несколько *мм*). Рассматривается двумерное (2D) движение в системе координат (XY), где горизонтальная ось X направлена вдоль контактной границы между пленкой и подложкой. Ось Y является осью симметрии лазерного луча. Вычислительный эксперимент начинается с момента времени, когда значение температуры определяется распределением поглощенной энергии по Гауссовому закону  $F = F_c \exp(-x^2/R_L^2)$  вдоль золотой пленки. В тонких пленках практически постоянное распределение температуры в нормальном направлении устанавливается за несколько пикосекунд (2-3 пикосекунды, 2Т стадия), поперечный перенос тепла в пределах пятна для радиусов  $R_L \approx 1 \text{ микрон}$  длится около наносекунды [233-235]. Поэтому на заданных временных масштабах мы пренебрегаем теплопроводностью в металлической пленке и диэлектрической подложке. В расчетах радиус фокального пятна составлял  $R_L = 250 \text{ нм}$ , а импульс имел фемтосекундную временную длительность.

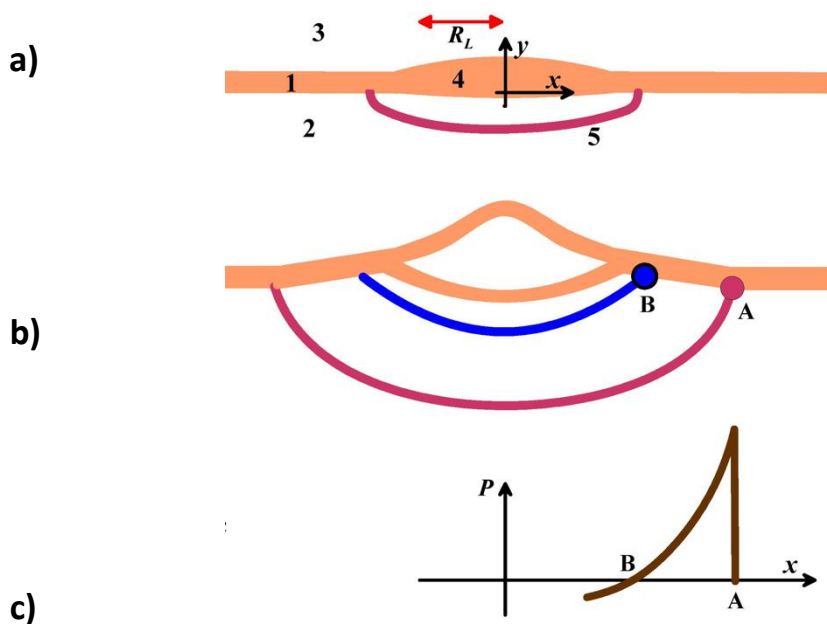
При воздействии фемтосекундного лазерного импульса в подложке создается положительное давление, действующее на пленку и ускоряющее ее в сторону вакуума. Выше некоторого порога давления скорость поперечного движения ускоренной пленки становится достаточной, чтобы отделиться от подложки. В таких случаях размер образовавшегося в пленке отверстия оказывается, как показывают опыты [266], значительно больше (до 10-и раз), чем фокальное лазерное пятно на поверхности пленки. В проведенных опытах [266] энергия поглощенного лазерного излучения экспоненциально затухает поперек зоны облучения  $F = F_c \exp(-\frac{r^2}{R_L^2})$ , где  $R_L$  – радиус Гауссова пучка,  $F$  и  $F_c$  – локальный и центральный флюенсы (энергии, поглощенные единицей поверхности вещества),  $r$  – расстояние до оси симметрии. При этом, согласно [266-268] ударная волна затухает в подложке значительно медленнее. Поэтому, в данном случае граница отверстия определяется распространением УВ в подложке и становится, как показывают расчеты, значительно больше фокального пятна лазерного пучка и оказывается близка к экспериментальным значениям [266].

В численном эксперименте анализируются следующие этапы взаимодействия фемтосекундного лазерного излучения с подложкой (Фиг.8.1):



1. Генерация ударной волны в подложке вследствие передачи импульса от металла через контактную границу;
2. Поперечное распространение УВ вдоль границы металла пленкой и диэлектрической подложки;
3. Структура и динамика давления за затухающей ударной волной;
4. Переход от одномерного к двумерному режиму распространения УВ.
5. Отделение металлической пленки от диэлектрической подложки в боковой волне разгрузки Римана, порождаемой двумерными гидродинамическими явлениями при движении ударной волны вдоль границы раздела металла и подложки.

Следуя [259,261-271], более детально опишем процессы распространения ударной волны в подложке под пленкой, ее влияние на движение пленки и ее последующую сепарацию пленки за пределами фокального пятна лазерного пучка. На **Фиг.8.2(а)** [262] схематически показана начальная геометрия пленки внутри светового пятна и распространение ударной волны (5) в стекло. На **Фиг.8.2(б)** представлена более поздняя стадия процесса, когда расширение пленки в подложку останавливается, и появляется зона отрицательного давления. Эта область, расширяющаяся со временем, находится между нижней границей пленки и синей кривой. Синяя кривая связана с волной разрежения, которая распространяется вниз от границы вакуум-золото [262]. На **Фиг.8.2(с)** схематически показано распределение давления в слое, сжатом ударной волной между красной и синей кривыми.



**Фиг.8.2** Действие лазерного потока [262] на золотую пленку 1, напыленную на толстую стеклянную подложку 2.  $R_L$  - радиус лазерного пучка, т.е. расстояние от оси, на котором интенсивность падает в  $e$  раз. 3- вакуум

Начальная стадия расширения пленки в нагретой области показана на **Фиг.8.2(a)**. Сразу после воздействия лазерного импульса (при  $t$  меньше  $10$  нс) реализуется практически одномерное движение, а давление за ударной волной (красная кривая на **Фиг.8.2(a)**) увеличивается с ростом локального поглощенного флюенса [262]. Действительно,  $R_L$  значительно больше толщины  $d_f$  пленки. Давление между УВ и контактной границей пленка-стекло положительно. Когда волна разрежения, распространяющаяся от границы между пленкой и вакуумом, достигает контактной границы пленка-стекло, она останавливает движение контактной границы в нижнем направлении и уменьшает давления над синей кривой на **Фиг.8.2(b)** до отрицательных значений. Поле давления в движущейся области внутри стеклянной подложки показано на **Фиг.8.2(c)**.

На **Фиг.8.2(b)** показано движение УВ в стеклянной подложке под золотой пленкой. Фронт УВ, соответствующий красной кривой на **Фиг.8.2(a)** и **Фиг.8.2(b)**, движется вниз и вдоль пленки. Точка А на **Фиг.8.2(a)** – это точка,

в которой УВ взаимодействует с пленкой. В сжатом слое стекла давление положительно между синей и красной кривыми **Фиг.8.2(b)**. При этом сжатый слой формирует квазиполусферическую область. Давление в этой области на интервале А-В ускоряет пленку в вертикальном направлении  $Y$  **Фиг.8.2(b)**. Таким образом, процесс сепарации металла на границе вызван действием УВ в стекле и боковым расширением стекла и пленки, вызванным этой УВ.

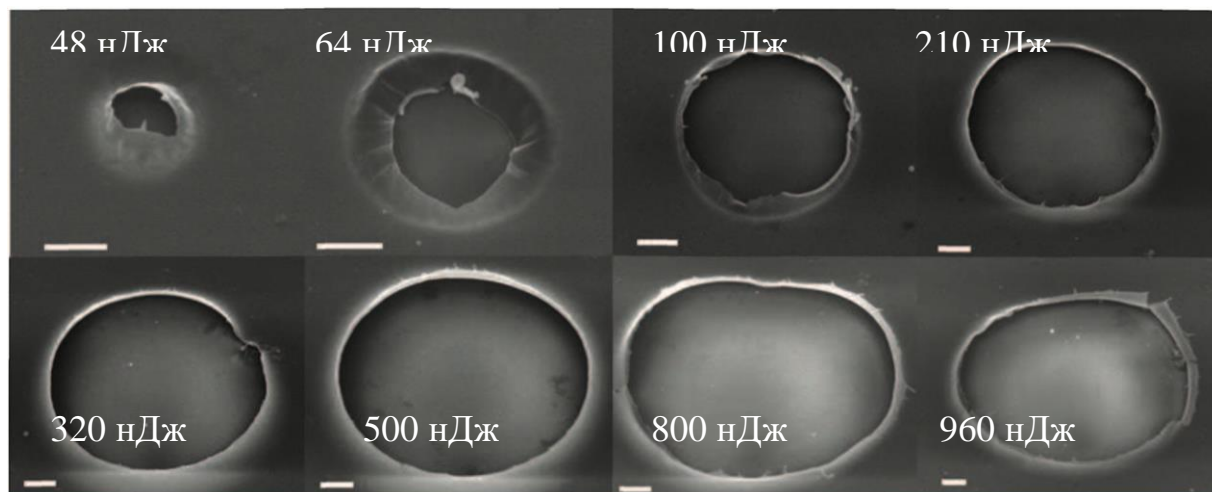
На границах расчетной области [262] использовались условия прозрачной границы, которые позволяют избежать нефизических отражений УВ. Поскольку в данной работе нас будут интересовать эффекты сепарации пленки металла, введем определенные упрощения в описании процессов поглощения лазерного излучения [262,263]. В соответствии с [232-236,272,269], поглощенный флюенс  $F_{abs}$  однородно увеличивает температуру по толщине пленки  $0 < y < 50nm$  и пропорционально Гауссовому распределению вдоль оси  $X$ . В [262,263] использован однотемпературный двумерный гидродинамический код (1Т-2D-НД), пренебрегая, таким образом, некоторыми особенностями, связанными с двухтемпературной (2Т) стадией. Эти особенности были исследованы в работах [234-236,273,272]. Для толстых золотых мишеней 2Т-стадия проанализирована в [269].

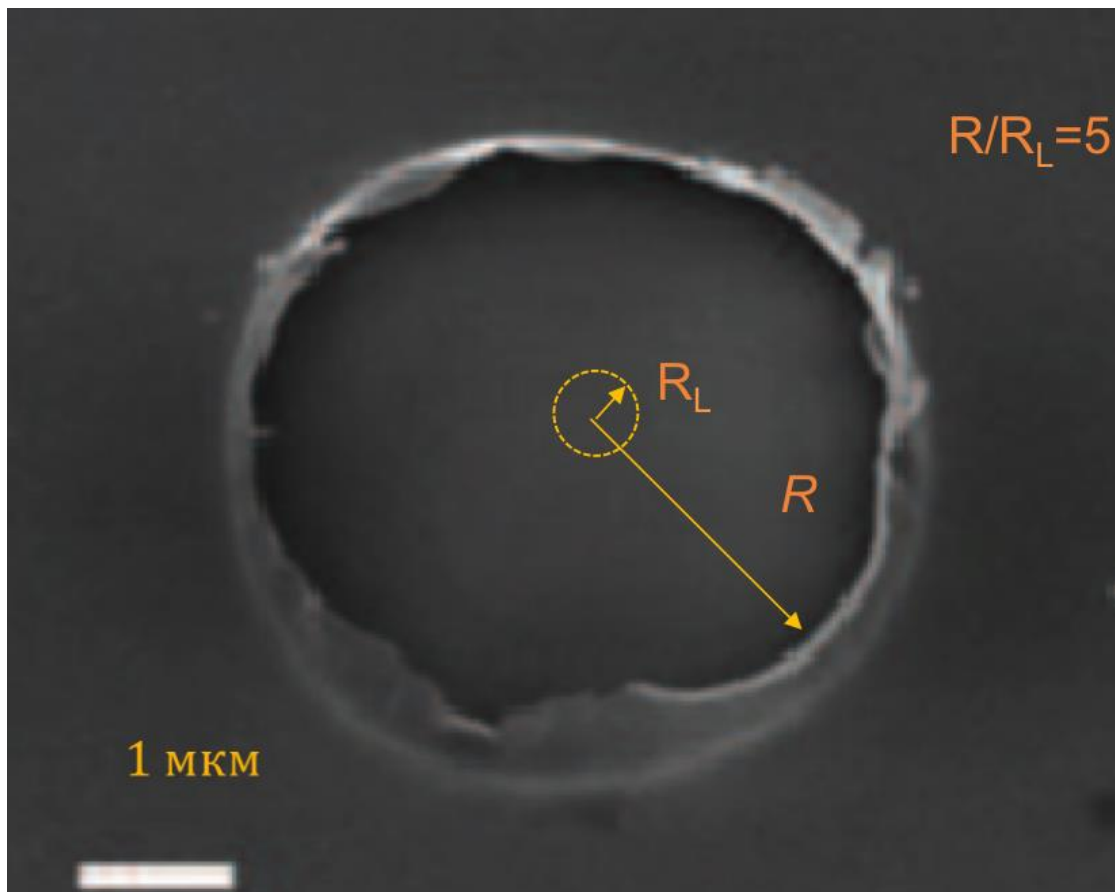
В данной работе, как мы отмечали выше, рассматривается случай «больших» пятен ( $R_L > 150$  нм). Поэтому используемая нами 1Т-2D-НД вычислительная модель описывает динамику, показанную на **Фиг.8.2**, в пренебрежении теплопроводностью. Для малых пятен  $R_L < 150$  нм е-кратный радиус пучка  $R_L$  должен быть заменен на радиус  $R_{spr}$  термически расширившегося пятна [272,269]. Пятно  $R_{spr}$  - это горячее пятно, сформировавшееся в конце акустической стадии, которая продолжалась до 10 ps. Радиус  $R_{spr}$  - это е-кратный радиус распределения температуры, сформировавшийся в конце акустической стадии. Он используется вместо радиуса  $R_L$  в моделировании, описывающем полет пленки после ее сепарации в пределах пятна в работах [234-236,262], так как процесс термомеханической сепарации происходит только на акустической стадии. Заметим, что коды 2D-2Т без гидродинамики и 1Т-2D-НД с гидродинамикой по существу дополняют друг друга.

## 8.2 Результаты натурального эксперимента

Результаты натурального эксперимента [237,238] показаны на **Фиг.8.3** и

**Фиг.8.4.** В натуральных экспериментах [238] использовалась вторая гармоника лазерного излучения с длиной волны 515 нм. Длительность импульса составляла 200 fs (full width half maximum, FWHM – полная ширина на уровне половины амплитуды). Численная апертура NA=0.25. Использовались серебряные пленки толщиной 50 нм, напыленные на стеклянную подложку.

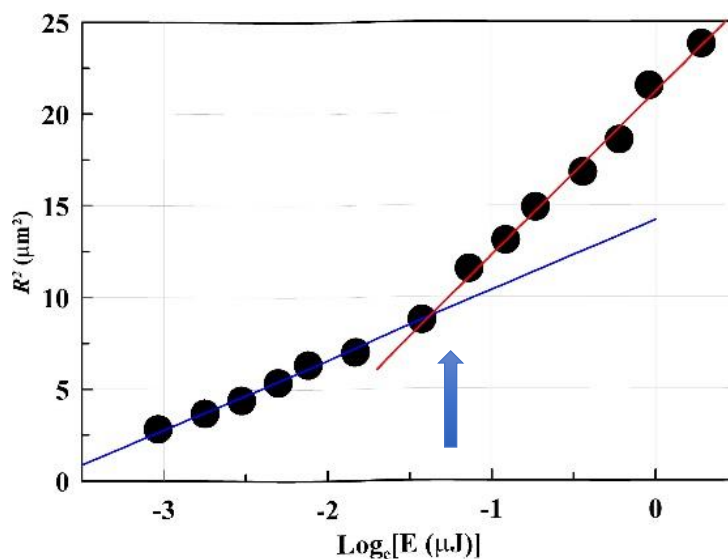




*Фиг.8.3 Фотографии, сделанные сканирующим электронным микроскопом. Визуализация поверхностей, облученных единичным лазерным импульсом*

На **Фиг.8.3** представлены изображения отверстий, образовавшихся после воздействия одиночных лазерных импульсов с помощью сканирующего электронного микроскопа. При превышении некоторого порога в пленке появляются отверстия (см. рисунок 1 в статье [238]). Пространственные масштабы на всех снимках равны одному микрону. Эксперимент проводился с восьмью разными энергиями импульсов, показанных на **Фиг.8.3**. Как мы видим, радиусы отверстий  $R$  растут с увеличением энергии лазерного импульса и в несколько раз превышают радиус фокального пятна  $R_L$ . Анализируя вид краев образовавшихся отверстий, можно заметить отсутствие валика из расплавленного и застывшего металла. Эти два факта объясняются влиянием принципиально иного, отличного от плавления, механизма образования отверстий. Образование отверстий происходит вследствие послойного механического отрыва пленки.

График зависимости квадрата размеров отверстия от энергии показан на **Фиг.8.4** [262].



**Фиг.8.4** Зависимость квадрата радиуса отверстий, показанных на **Фиг.8.3**, от логарифма энергии лазерных импульсов, создавших отверстия

На **Фиг.8.4** заметен выраженный излом (стрелка) в распределении роста радиуса отверстия. Первое семейство точек относится к довольно слабым энергиям лазерной вспышки, когда радиус отверстия растет согласно закону  $x_m = R_L \sqrt{\ln(F_c/F_m)}$ . В этом режиме пленка отделяется от подложки благодаря высоким давлениям на протяжении промежутка времени акустического масштаба [234-236]. Второе семейство точек соответствует повышенной энергии импульса. Положение границы отверстия здесь определяется интенсивностью затухающей ударной волны, движущейся в подложке под пленкой. В этом случае поле давления за ударной волной толкает изначально неподвижную пленку вверх. Таким образом, в первом семействе точек зона высоких давлений находится в пленке, а во втором семействе – в стекле.

В данной главе численно исследуются гидродинамические механизмы появления этого излома и сопутствующие этому физические явления. Положение излома относится к энергиям  $\approx 100$  нДж, и он находится в диапазоне энергий, соответствующих отверстиям на **Фиг.8.3**.

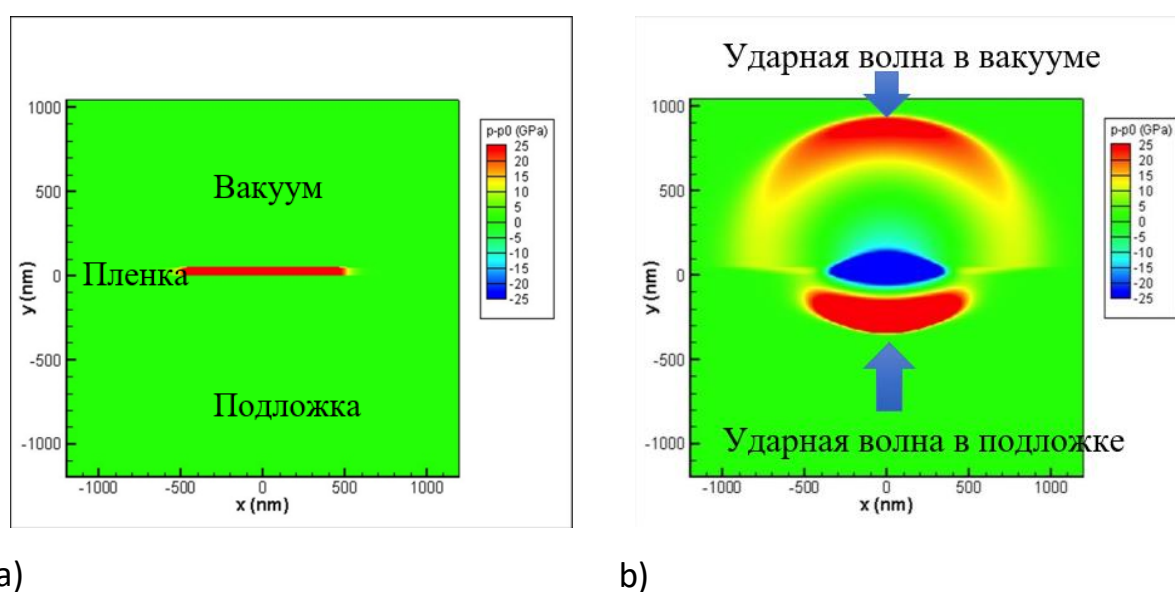
### 8.3 Результаты численного эксперимента

Вычислительная область представляет собой прямоугольник размером 2400 x 2250 нм. Общее количество расчетных ячеек составляло 480x450. Размер одной ячейки 5 нм. Начальная плотность в каждом слое постоянна, начальная скорость равна нулю. Верхний слой соответствует вакууму, средний золоту и нижний стеклу. Начальное давление в стекле и в вакууме равно фоновому и составляет 100 ГПа. Начальное давление в пленке распределено так, чтобы соответствовать реальному распределению давления в металле после 2Т-стадии в области светового пятна радиусом  $R_L=250$  нм. Это гауссово распределение с  $e$ -кратным радиусом  $R_L$ . Давления в пленке пробегает значения от 100 до 1000 ГПа.

Граничными условиями выбраны полностью проницаемые стенки, чтобы возмущения могли свободно уходить за края вычислительной области и не влиять на дальнейшие процессы.

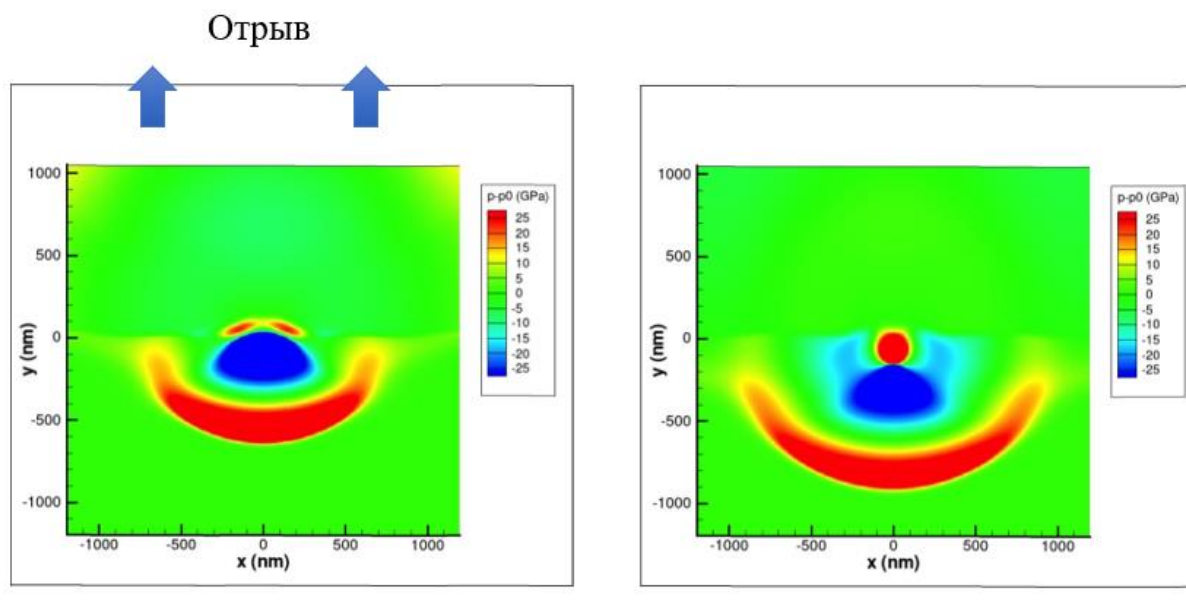
Для описания вакуума выбрана плотность  $200 \text{ кг/м}^3$ , малая по сравнению с начальными плотностями золота  $19300 \text{ кг/м}^3$  и стекла  $2300 \text{ кг/м}^3$ .

Результаты представленного в этой части работы моделирования для наибольшего из пространственных масштабов представлены в виде дисплей-примеров [263-268,271]. Эти результаты использовались для построения зависимости скоростей, показанных на **Фиг.8.3(b)**. На **Фиг.8.5-Фиг.8.7** показано формирование и движение двух ударных волн: одна из них распространяется в стекло, а вторая – в вакуум.



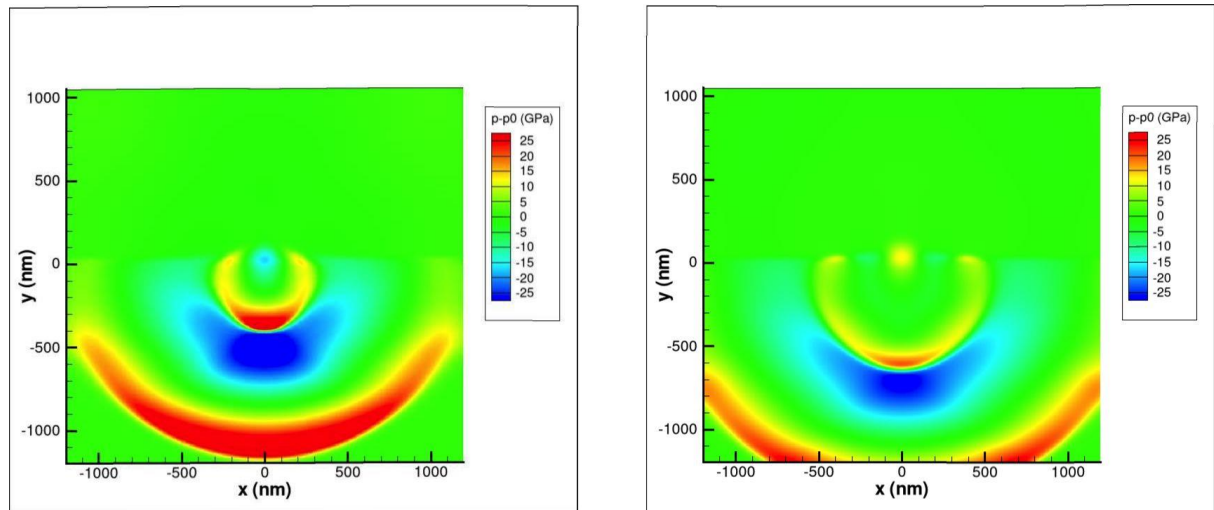
**Фиг.8.5** Формирование сферической ударной волны, распространяющейся в направлении подложки. (a) - начальное распределение давления при  $t=0$ , что соответствует моменту

времени перед расширением пленки. (b) - распределение давления в момент времени  $t=20$  ps



**Фиг.8.6** Распространение сферической ударной волны в подложке. (a) - распределение давления в момент времени  $t=40$  ps. Движение краев УВ вдоль поверхности в направлении оси  $Y$  вызывает отрыв пленки от подложки. Дальнейшее распределение давления при  $t=60$  ps показано на рисунке (b)



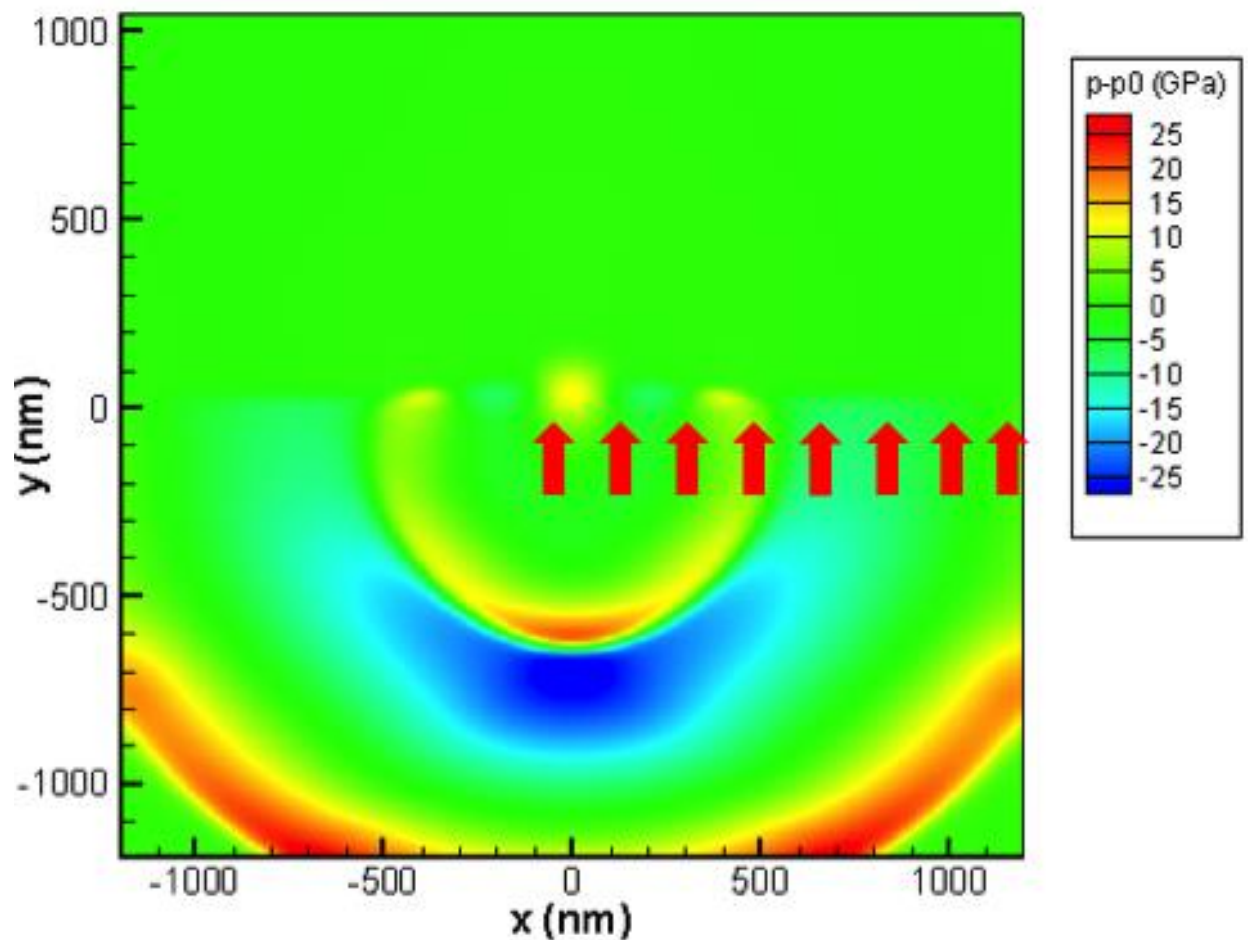


**Фиг.8.7** Распространение сферической ударной волны в подложке. (а) - распределение давления в момент времени  $t=80$  ps. Движение краев УВ вдоль поверхности в направлении оси  $Y$  вызывает отрыв пленки от подложки. К этому моменту времени ударная волна в стекле практически достигла нижней границы вычислительной области. Ускорение пленки, скользящей в стекле вдоль границы с пленкой, закончено в пределах рассмотренной области моделирования. Дальнейшее распределение давления при  $t=100$  ps показано на рисунке (b)

Видно, как ударная волна, движущаяся в подложке, порождается расширением быстро нагреваемой лазерным излучением пленки вглубь подложки. Согласно [233-235], пленка нагревается лазерным излучением быстрее, чем звуковая волна пересекает пленку  $t_{heating} \ll t_s = d_f/c_s$ , а нагрев пленки происходит однородно по всей толщине. Это приводит к тому, что контактная граница между разогретой пленкой и подложкой действует как поршень, вызывающий волну сжатия в подложке [233-235]. Ускорение пленки продолжается в течение интервала времени акустического масштаба  $t_s$ , см. [233-235]. После прохождения волны сжатия к контактной границе прибывает волна разрежения от внешней границы пленки, и поршень перестает давить на подложку.

По результатам численного моделирования [233-235] ударная волна в подложке на значительном расстоянии трансформируется в так называемую «треугольную» ударную волну- **Фиг.8.2(с)** [131,263]. При этом в процессе распространения ударно- волновое давление вещества уменьшается. Когда расстояние, пройденное ударной волной, становится порядка радиуса светового пятна  $R_L$  возникает переход из 1D в 2D-режим распространения ударной волны в подложке. При поглощенных энергиях ниже флюенса

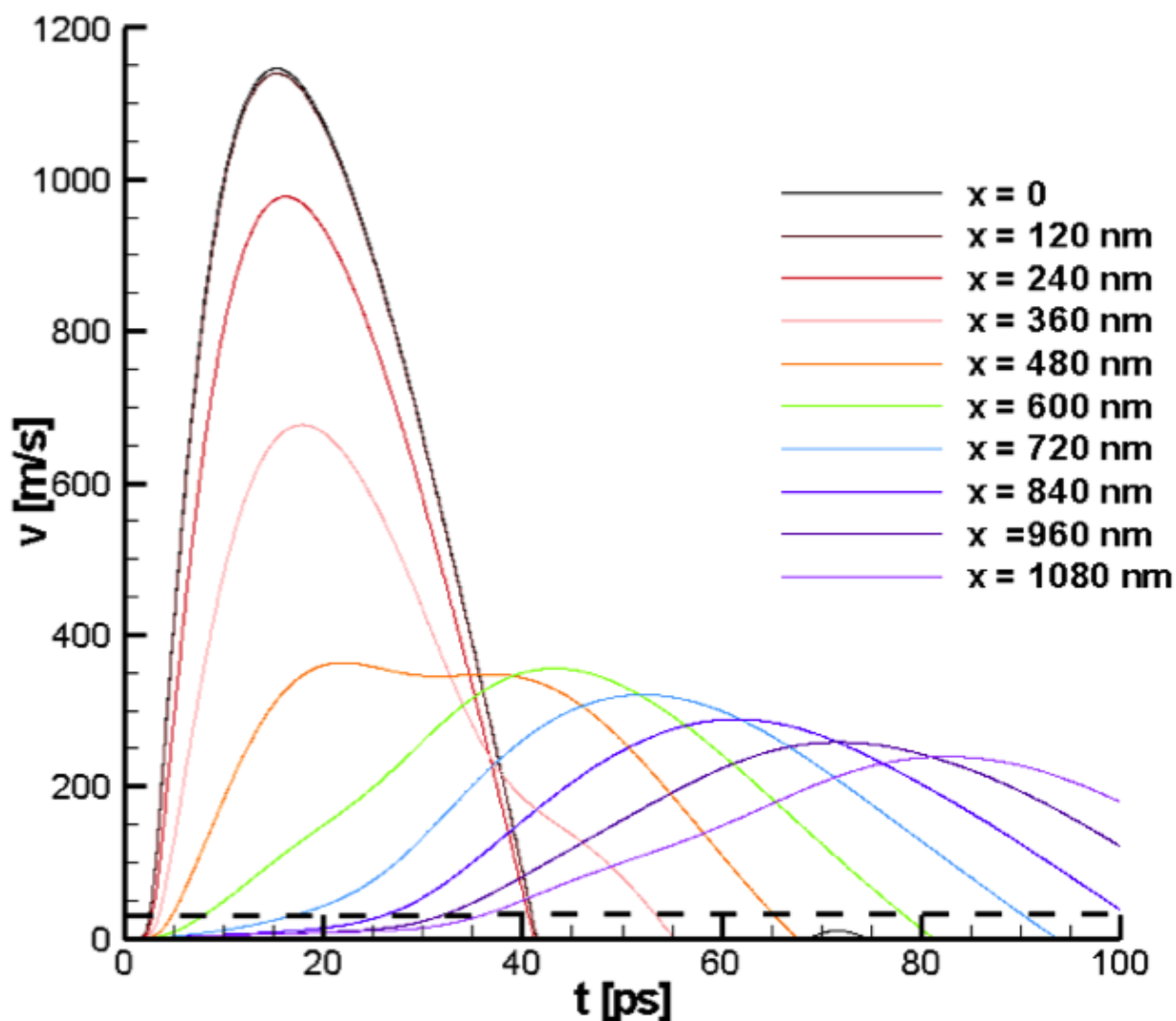
перехода  $F_{1D-3D}$  амплитуда ударной волны мала. На расстояниях  $\gg R_L$  она не влияет на движение пленки по оси  $Y$  и не вызывает сепарацию пленки вне лазерного пятна  $R_L$  [233-235]. Но при энергиях выше флюенса перехода  $F_{1D-3D}$  ударная волна достаточно сильна, чтобы вызвать сепарацию пленки даже за пределами фокального пятна  $R_L$ .



**Фиг.8.8** Накопившийся импульс в контрольных точках (показаны стрелочками). Он толкает слои металла пленки вверх, действуя, как поршень

Для сугубо количественной оценки явления мы оценим величину импульса, ускоряющего пленку в направлении от подложки, который накопился за время прохождения ударной волны. Этот импульс будет различаться в зависимости от выбранной контрольной точки (см. **Фиг.8.8**). Выберем 10 точек в направлении от центра до границы области. В центральных точках величина импульса будет наибольшей, уменьшаясь к

границам области. Это связано с затуханием ударной волны и соответствующим уменьшением давления от центра к краям.



Фиг.8.9 Эволюция скоростей в контрольных точках

Отнеся импульс к толщине и плотности пленки, получаем оценку скорости ускоряемого вещества в каждой контрольной точке. Там, где эта скорость будет достаточной, накопленный импульс оторвет слой металла от стекла, там, где нет, отрыва не будет. В результате получится наблюдаемое в опытах отверстие.

На основе 1D-расчетов с реальным УРС была сделана оценка пороговой скорости отрыва золота от стекла. Она составляет около 30 м/с [274].

Основываясь на этой логике, можно сделать порядковую оценку радиуса отверстия. Она составляет 2 микрона.

Таким образом, в данной работе численными методами воспроизводится альтернативный термомеханическому ударно-волновой механизм образования отверстия в тонкой пленке на диэлектрической подложке при воздействии мощного лазерного излучения. Данный гидродинамический механизм объясняет существование отверстий, значительно превосходящих радиус лазерного (до 10 раз) пучка.

В заключении этой главы отметим любопытную аналогию между обсуждаемыми нами лазерными экспериментами отрыва тонких металлических пленок в результате бокового разлета ударно-сжатого вещества и предложенной в 30-х годах академиком Ю.Б. Харитоном теорией «критического диаметра» конденсированного ВВ. В теории Ю.Б. Харитона также, как в описанном выше лазерном боковом отрыве, боковой разлет внешних слоев цилиндрических зарядов ВВ порождает боковую разгрузку в волнах Римана, в которых происходит охлаждение ВВ и как следствие- срыв химической реакции разложения ВВ и результирующее затухание детонации ВВ [275].

#### 8.4 Выводы

1. Проведен двумерный численный анализ отрыва тонкой металлической пленки вследствие прохождения ударной волны в диэлектрической подложке.
2. Показано, что диаметр отверстия в пленке определяется динамикой ударной волны под пленкой. Этот результат позволяет объяснить появление больших отверстий в обсуждаемых в настоящей работе лазерных экспериментах. Диаметры этих отверстий значительно превышают диаметр пучка на поверхности мишени (до 10 раз).
3. Численное моделирование проведено с использованием пакета прикладных программ **HYPERBOLIC\_SOLVER**. Применен известный метод Годунова первого порядка [10], межсеточные потоки рассчитываются на основе точного решения задачи о распаде разрыва.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Самарский А.А., Вабищевич П.Н., Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. – Институт математического моделирования РАН, 2000.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Механика сплошных сред. – М.: Гостехтеориздат, 1953.
3. Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н., Системы квазилинейных уравнений – М.: Наука, 1978.
4. Лойцянский Л.Г., Механика жидкости и газа. – 6-е изд. – М.: Наука, 1987.
5. Монин А.С., Яглом А.М., Статистическая гидромеханика. – том 1,2. – М.: Наука, 1965, 1967.
6. Белоцерковский О.М., Опарин А.М., Чечеткин В.М., Турбулентность: новые подходы. – М.: Наука, 2002.
7. Фабер Т.Е., Гидроаэродинамика. – М.: Постмаркет, 2001.
8. Годунов С.К., Рябенский В.С., Введение в теорию разностных схем. – М.: Физматгиз, 1962.
9. Роч П., Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980.
10. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П., Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – с. 100-110.
11. Белоцерковский О.М., Математическое моделирование на суперкомпьютерах (опыт и тенденции) // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2000, том 40, № 40.
12. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю., Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: Физматлит, 2001.
13. Четверушкин Б.Н., Гиперболическая квазигазодинамическая система // Матем. Моделирование. – 2018, том 30, № 2. – с. 81-98.
14. Самарский А.А., Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977.

15. *Панов Ю.Д.*, Численное решение квазилинейных гиперболических систем дифференциальных уравнений в частных производных. – М.: Гостехиздат, 1957.
16. *Магомедов К.М., Холодов А.С.*, Сеточно-характеристические численные методы. – М.: Наука, 1988.
17. *Оден Дж.*, Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред. – М.: Мир, 1976.
18. *Leonard A.*, Vortex methods for flow simulation // *Journal of Computational Physics*. – 1980, vol. 37.
19. *Белоцерковский О.М., Чушкин П.И.*, Численный метод интегральных соотношений // *ЖВМ и МФ*. – 1962, том 2, № 5.
20. *Харлоу Ф.Х.*, Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // *Вычислительные методы в гидродинамике*. – М.: Мир, 1967.
21. *Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М.*, Метод крупных частиц в газовой динамике. – М.: Наука, 1982.
22. *Harlow F.H., Welch J.F.*, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface // *Phys. Fluids*. – 1965, vol. 8.
23. *Соболев И.М.*, Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука, 1973.
24. *Четверушкин Б.Н.*, Кинетически согласованные разностные схемы для задач газовой динамики. – М.: Наука, 1998. – 280 с.
25. *Белоцерковский О.М.*, Численное моделирование в механике сплошных сред. – М.: Физматлит, 1994.
26. *Riemann B.*, *Über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite. Abhandl. Von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, math. Klasse 8, p. 43-45* (Рус. пер.: Риман Б. (1949) О распространении плоских волн конечной амплитуды. В кн.: *Сочинения*, Гостехиздат, Москва, 1860, с. 376-395.
27. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.*, Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1966. – 724 с.
28. *Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н.*, Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. – М.: Наука, 1968. – 546 с.
29. *Годунов С.К.*, Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1971. – 416 с.

30. *Massau J.*, Mémoire sur l'intégration graphique des équations aux dérivées partielles, F. Mayer-van Loo, Ghent, 1899.
31. *Courant R., Friedrichs K., Lewy H.*, Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik // *Math. Annalen.* – 1928, vol. 100, pp. 32-74.
32. *Courant R., Isaacson E., Rees M.*, On the solutions of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences // *Commun. Pure and Appl. Math.* 1952, vol. 5, № 5, pp. 243-254.
33. *Магомедов К.М., Холодов А.С.*, О построении разностных схем для уравнений гиперболического типа на основе характеристических соотношений // *Журнал вычислительной математики и математической физики.* – 1969, том 9, № 2, с. 383-396.
34. *Магомедов К.М., Холодов А.С.*, Сеточно-характеристические численные методы. – М.: Наука, 1988. – 287 с.
35. *Lax P.D.*, Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computations // *Comm. Pure and Applied Mathematics.* – 1954, vol. 7.
36. *Lax P.D., Wendroff B.*, Systems of conservation laws // *Comm. Pure and Applied Mathematics.* – 1960, vol. 13.
37. *Neuman J., Richtmyer R.D.*, A method for numerical calculation of hydrodynamic shocks // *Journal of Applied Physics.* – 1950, vol. 21, № 1.
38. *Friedrichs K.O.*, Symmetric hyperbolic linear differential equations // *Comm. Pure Appl. Math.* – 1954, vol. 7, p. 345.
39. *Lax P.D., Wendroff B.*, Systems of conservation laws // *Comm. Pure and Applied Mathematics.* – 1960, vol. 13.
40. *Richtmyer R.D.*, A survey of difference methods for nonsteady fluid dynamics // *NCAR Technical Note 63-2.* – Colorado, Boulder, 1963
41. *MacCormack R.W.*, The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering // *AIAA Paper.* – 1969, № 69-354, p. 7.
42. *Годунов С.К.*, Разностный метод расчета ударных волн // *УМН.* – 1957, том 12, вып. 1, с. 176-177.
43. *Годунов С.К.*, Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // *Математический сборник.* – 1959, том 47, вып.3, с. 271-306.

44. Годунов С.К., Забродин А.В., Прокопов Г.П., Разностная схема для двухмерных нестационарных задач газовой динамики и расчет обтекания с отошедшей ударной волной // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1961, том 1, № 6, с. 81-86.
45. Годунов С.К., О неединственном «размазывании» разрывов в решениях квазилинейных систем // Доклады Академии Наук СССР. – 1961, том 136, № 2.
46. Годунов С.К., Элементы механики сплошных сред. – М.: Наука, 1978.
47. Godunov, S.K., Klyuchinskii, D.V., Fortova, S.V. et al., Experimental Studies of Difference Gas Dynamics Models with Shock Waves // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2018, vol. 58, № 8, pp. 1201–1216.
48. Osher S., Riemann solvers, the entropy condition and difference approximations // SIAM Journal of Numerical Analysis. – 1984, vol. 21.
49. van Leer B., Towards the ultimate conservative difference scheme. III. Upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow // Journal of Computational Physics. – 1977, vol. 23, pp. 263-275
50. van Leer B., Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection // Journal of Computational Physics. – 1977, vol.23, pp. 276-299.
51. van Leer B., Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // Journal of Computational Physics. – 1979, vol. 32.
52. Yamamoto S., Daiguji H. // Computers and Fluids. – 1993, vol. 22.
53. Магомедов К.М., Холодов А.С., О построении разностных схем для уравнений гиперболического типа на основе характеристических соотношений // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1969, том 9, № 2, с. 383-396.
54. Roe P.L., Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes // Journal of Computational Physics. – 1981, vol. 43.
55. Roe P.L., Characteristic-based schemes for the Euler equations // Ann. Rev. Fluid Mechanics. – 1986, vol. 18.
56. Roe P.L., Pike J., Efficient construction and utilization of approximate Riemann solutions // Computing Methods in Applied Sciences and



- Engineering, ed. Glowinski R.G., Lions J.L. – Amsterdam, North-Holland. – 1984, vol. 6.
57. *Roe P.L.*, Some contributions to the modeling of discontinuous flows // Lectures in Applied Mathematics. – 1985, vol. 22.
58. *Harten A.*, High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // Journal of Computational Physics. – 1983, vol. 49, № 2.
59. *Колган В.П.*, Приложение принципа минимума производной к построению конечно-разностных схем для численного анализа разрывных течений газодинамики // Ученые записки ЦАГИ. – 1972, том 3, № 6.
60. *Harten A., Osher S.*, Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. I // SIAM Journal of Numerical Analysis. – 1987, vol. 24.
61. *Вязников К.В., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П.*, Построение монотонных разностных схем повышенного порядка аппроксимации для систем линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами гиперболического типа // Математическое моделирование. – 1989, том 1, № 5.
62. *Engquist B., Osher S.*, One-sided difference approximations for nonlinear conservation laws // Math. Comput. . – 1981, vol. 36.
63. *Osher S.*, Numerical solution of singular perturbation problems and hyperbolic systems of conservation laws // North Holland Mathematical Studies. – 1981, vol. 47.
64. *van Leer B.*, Flux-vector splitting for the Euler equations // Lecture Notes in Physics. – 1982, vol. 170.
65. *Steger J.L., Warming R.F.*, Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite difference methods // Journal of Computational Physics. – 1981, vol. 40, № 2.
66. *Yee H.C., Warming R.F., Harten A.*, Application of TVD schemes for the Euler equations of gas dynamics // Lectures in Applied Mathematics. – 1985, vol. 22.
67. *Harten A., Zwas G.*, Self-adjusting hybrid schemes for shock computations // Journal of Computational Physics. – 1972, vol. 6.
68. *Белоцерковский О.М., Гуцин В.А., Коньшин В.Н.*, Метод расщепления для исследования течений стратифицированной жидкости со свободной

- поверхностью // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1987, том 27.
- 69.** *Harten A.*, On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes // NYU Report – New York, NYU. – 1982.
- 70.** *Harten A.*, The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities: III. Self-adjusting hybrid schemes // Math. Comput. – 1978, vol. 32.
- 71.** *Chakravarthy S.R., Osher S.*, Computing with high-resolution upwind schemes for hyperbolic equations // Lectures in Applied Mathematics. – 1985, vol. 22.
- 72.** *Harten A., Engquist B., Osher S., Chakravarthy S.R.*, Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory schemes. III // Journal of Computational Physics. – 1987, vol. 71.
- 73.** *Холодов А.С., Холодов Я.А.*, О критериях монотонности разностных схем для уравнений гиперболического типа // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2006, том 46, № 9, с.1638-1667.
- 74.** *Харлоу Ф.Х.*, Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. – М.: Мир, 1967.
- 75.** *Четверушкин Б.Н., Якобовский М.В.*, Вычислительные алгоритмы и архитектура систем высокой производительности // Препринты ИПМ им.М.В. Келдыша. – 2018, 052.
- 76.** *Ковеня В.М., Яненко Н.Н.*, Методы расщепления в задачах газовой динамики. – Новосибирск: Наука, 1981.
- 77.** *Годунов С.К., Прокопов Г.П.*, О расчетах конформных отображений и построении сеток поверхностью // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1967, том 7, №5, с.1031-1060.
- 78.** *Крагинский Л.М.*, Универсальная технология параллельных вычислений для численного моделирования задач, описываемых системами уравнений гиперболического типа, и ее применение // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математической наук. – М., 2003.
- 79.** *Фортова С. В., Крагинский Л. М., Чикиткин А.В., Опарина Е.И.*, Программный пакет для решения гиперболических систем уравнений // Матем. моделирование. – 2013, том 25, № 5, с. 123-135.

80. *Фортова С.В., Опарина Е.И., Крагинский Л.М.*, Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013618035 TURBULENCE PROBLEM SOLVER (TPS). – 2013.
81. *Белоцерковский О.М., Фортова С.В.*, Макропараметры пространственных течений в свободной сдвиговой турбулентности // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2010, том 50, № 6, с. 1-14.
82. *Белоцерковский О.М., Фортова С.В.*, Исследование каскадного механизма развития турбулентности в свободно- сдвиговом течении // Доклады АН. –2012, том 443, № 1, с. 1-4.
83. *Долуденко А.Н., Фортова С.В.*, Численное моделирование Релей-Тейлоровской неустойчивости невязкой и вязкой средах // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2015, том 55, № 5, с. 876–885.
84. *Utkin, P.S., Fortova, S.V.*, Mathematical modeling of impact of two metal plates using two-fluid approach // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 946, 012047.
85. *Бebb Р., Мак-Гроу Дж., Акселрод Т.*, Программирование на параллельных вычислительных системах. – М.: Мир, 1991.
86. *Воеводин В.В.*, Информационная структура алгоритмов. – М.: Изд-во МГУ, 1997.
87. *Воеводин В.В.*, Математические модели и методы в параллельных процессах. – М.: Наука, 1986.
88. *Van der Vorst H.*, Parallel iterative solution methods for linear systems arising from discretized PDE's // Special course on parallel computing in CFD, AGARD-R-807 – France, Neuilly-sur-Seine, AGARD, Workshop Lecture Notes. – 1995.
89. <http://logos.vniief.ru>
90. *Новиков А.В.*, Пакет расчётных программ hflow: моделирование начала лтп на гиперзвуке; моделирование физико- химических процессов // Третий слёт «Отечественные CFD коды 2016» (CFD Weekend-2016). – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, декабрь 2016.
91. *Шаргатов В.А.*, Комплекс АВАНГАРД, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» // Третий слёт

- «Отечественные CFD коды 2016» (CFD Weekend-2016). – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, декабрь 2016.
- 92.** Бендерский Л.А., Любимов Д.А., Макаров А.Ю., Соловьева А.А., Терехова А.А., Федоренко А.Э., Честных А.О., Код Jet3D: развитие в 2016 году // Третий слёт «Отечественные CFD коды 2016» (CFD Weekend-2016). – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, декабрь 2016.
- 93.** Абалакин И.В., Бахвалов П.Б., Бобков В.Г., Дубень А.П., Горобец А.В., Жданова Н.С., Козубская Т.К., Программный комплекс NOISEtte // Четвертый слёт «Отечественные CFD коды 2017» (CFD Weekend-2017). – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, декабрь 2017.
- 94.** [https://keldysh.ru/papers/2011/prep20/prep2011\\_20.pdf](https://keldysh.ru/papers/2011/prep20/prep2011_20.pdf)
- 95.** Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов: учебное пособие для вузов / В. М. Головизнин [и др.]. – М.: Изд-во МГУ, 2013. – 467 с.
- 96.** <https://flowvision.ru>
- 97.** Зибаров А.В., Пакет прикладных программ GAS DYNAMICS TOOL и его применение в задачах численного моделирования газодинамических процессов // Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. – Тула, 2000. <http://www.dissercat.com/content/paket-prikladnykh-programm-gas-dynamics-tool-i-ego-primeneniye-v-zadachakh-chislennogo-modeli#ixzz5Uw4mqfUO>
- 98.** [www.flow3d.com](http://www.flow3d.com)
- 99.** [www.lstc.com](http://www.lstc.com)
- 100.** [www.ansys.com](http://www.ansys.com)
- 101.** [www.fluent.com](http://www.fluent.com)
- 102.** Яненко Н.Н., Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. – Новосибирск: Наука, 1967.
- 103.** Strang J., On the construction and comparison of difference schemes // SIAM Journal of Numerical Analysis. – 1968, vol. 5.
- 104.** Anderson W.K., Thomas J.L., van Leer B., Comparison of finite volume flux vector splittings for the Euler equations // AIAA Journal. – 1986, vol. 24, № 9.

105. *Yang J.Y.*, Third-order nonoscillatory schemes for the Euler equations // AIAA Journal. – 1991, vol. 29, № 10.
106. *Опарин А.М.*, Численное моделирование проблем, связанных с интенсивным развитием гидродинамических неустойчивостей. // Сборник статей «Новое в численном моделировании: алгоритмы, вычислительный эксперимент, результаты» под ред. А.С. Холодова. – М.: Наука, 2000.
107. *Гришин Ю.А.*, Новые схемы метода крупных частиц и их использование для оптимизации газоздушных трактов двигателей // Математическое моделирование. – 2000, том 14, № 8.
108. *Сафронов А.В.*, Кинетические интерпретации численных схем для уравнений газодинамики // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2009, том 8.
109. *Русанов В.В.*, Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1961, том 1, № 2, с. 267-279.
110. *Harten A., Lax P.D., Van Leer B.*, On Upstream Differencing and Godunov-type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws // SIAM Review. – 1981, vol. 25, №.1, pp. 35-61.
111. *Toro E.F., Spruce M., Speares S.*, Restoration of the Contact Surface in the HLL Riemann Solver // Shock Waves. – 1994, vol. 4, pp. 25-34.
112. *Toro E.F.*, Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. – Springer-Verlag. Second Edition, June 1999.
113. *LeVeque R.J.*, Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. – Cambridge Texts in Applied Mathematics, 2004.
114. *Stein E., R. de Borst, Hughes T.*, Encyclopedia of Computational Mechanics. – John Wiley & Sons, Ltd. England, 2004.
115. *Bram van Leer*, Review article. Upwind and High-Resolution Methods for Compressible Flow: From Donor Cell to Residual-Distribution Schemes // Commun. Comput. Phys. – 2006, vol. 1, № 2, pp. 192-206.
116. *Berger M., Aftosmis M.J.*, Analysis of Slope Limiters on Irregular Grids // AIAA. – 2005, 2005- 0490.
117. *Годунов С.К., Ключинский Д.В., Фортова С.В., Шенелев В.В.*, Экспериментальные исследования разностных моделей газовой

- динамики с ударными волнами // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2018, том 58, № 8, с. 5-19.
- 118.** *Godunov S.K., Klyuchinskiy D.V., Safronov A.V., Fortova S.V., Shepelev V.V.*, Experimental study of numerical methods for the solution of gas dynamics problems with shock waves // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 946, № 012048.
- 119.** *Годунов С.К., Денисенко В.В., Ключинский Д.В., Фортова С.В., Шепелев В.В.*, Исследование энтропийных свойств линеаризованной редакции метода Годунова // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2020, том 60, № 4, с. 639-651.
- 120.** *Shepelev V.V., Fortova S.V., Inogamov N.A.*, Thermal and dynamic effects of laser irradiation of thin metal films // Материалы Международного Симпозиума «Fundamentals of laser assisted micro- and nanotechnologies». – 30 июня-4 июля 2019 г., Санкт-Петербург, Россия.
- 121.** *Fayad M. E., Schmidt D. C., Johnson R. E.*, Building Application Frameworks: Object-Oriented Foundations of Framework Design. – Wiley, 1999.
- 122.** Snir M., Otto S., Huss-Lederman S., Walker D., Dongarra J., MPI: The Complete Reference. – MIT Press, 1996.
- 123.** *Zeigler B.P.*, Object-Oriented Simulation with Hierarchical, Modular Models. – New York: Academic Press, 1990.
- 124.** The ScaLAPACK Project – <http://www.netlib.org/scalapack/index.html>
- 125.** *Кочин Н.Н., Кибель И.А., Розе Н.В.*, Теоретическая гидромеханика. – М.: Физматлит, 1963.
- 126.** *Anderson W.K., Thomas J.L., van Leer B.*, Comparison of finite volume flux vector splittings for the Euler equations // AIAA Journal, 1986, vol.24, № 9.
- 127.** *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.*, Теоретическая физика. Статистическая физика. – 3-е изд., испр. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1976. – 584 с. (т. V).
- 128.** *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.*, Теоретическая физика. Гидродинамика. – 3-е изд., испр. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. – 736 с. (т. VI).
- 129.** *Elieser S., Ghatak A.K., Hora H.*, An Introduction to Equations of State: Theory and Applications. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1986.
- 130.** *Жарков В.Н., Калинин В.А.*, Уравнения состояния твердых тел при

- высоких давлениях и температурах. – М.: Наука, 1968.
131. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П., Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. – М.: Физматлит, 2008.
  132. Ломоносов И.В., Фортлова С.В., Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. – 2017, том 55, вып. 4, с. 596–626.
  133. *Frontiers in High Energy Density Physics* / Ed. by D. Henderson. – Washington: National Research Council, Nat. Acad. Press, 2003.
  134. Hertel E. S., Bell R. L., Elrick M. G. et al., CTH: A software family for multi-dimensional shock physics analysis // *Shock Waves @ Marseille I: Hypersonics, Shock Tube & Shock Tunnel Flow* / Ed. by R. Brun, L. Z. Dumitrescu. – Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1995. – pp. 377–382.
  135. Robinson A., Brunner T., Carroll S. et al., ALEGRA: An arbitrary Lagrangian-Eulerian multimaterial, multiphysics code // 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. – 2008. – p. 1235.
  136. Ferrari A., Dumbser M., Toro E. F., Armanini A., A new 3D parallel SPH scheme for free surface flows // *Computers & Fluids*. – 2009, vol. 38, № 6, p. 1203–1217.
  137. Гасилов В. А., Болдарев А. С., Дьяченко С. В. и др., Пакет прикладных программ MARPLE3D для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы // Математическое моделирование. – 2012, том 24, № 1, с. 44–87.
  138. Langer S. H., Karlin I., Marinak M. M., Performance characteristics of HYDRA—a multi-physics simulation code from LLNL // *International Conference on High Performance Computing for Computational Science* / Springer. – 2014, p. 173–181.
  139. Куропатенко В.Ф., Модели механики сплошных сред. – Челябинск: Челяб. гос. ун-т, 2007. – 303 с.
  140. Валько В.В., Ломоносов И.В., Острик А.В. и др., Широкодиапазонные уравнения состояния конструкционных материалов // Физика ядерного взрыва. В 5 т. Том 2. Действие взрыва. – М.: Физматлит, 2010, с. 140–228.
  141. Jayaraman A., Diamond anvil cell and high pressure physical investigation // *Rev. Mod. Phys.* – 1983, vol. 55, p. 65–108.

142. *Dubrovinsky L. et al.*, Implementation of micro-ball nanodiamond anvils for high-pressure studies above 6 Mbar // *Nature Communications*. – 2012, 3:1163, p. 1-7.
143. *Tateno S., Hirose K., Ohishi Y., Tatsumi Y.*, The structure of iron in earth's inner core // *Science*. – 2010, vol. 330, № 6002, p. 359-361.
144. *Альтшуллер Л. В.*, Применение ударных волн в физике высоких давлений // *Успехи физических наук*. – 1965, том 85, № 2, с. 199-258.
145. *McQueen R. G., Marsh S. P., Taylor J. W. et al.*, The equation of state of solids from shock wave studies // *High Velocity Impact Phenomena* / Ed. by R. Kinslow. – New York: Academic Press, 1970, p. 293–417. – Appendices on pp. 515-568.
146. *Compendium of Shock Wave Data (Report UCRL-50108)* / Ed. By M. Van Thiel. – Livermore: Lawrence Livermore Lab., 1977.
147. *LASL Shock Hugoniot Data* / Ed. by S. P. Marsh. – Berkeley: Univ. of California Press, 1980.
148. *Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Трунин Р.Ф., Фортков В.Е.*, Экспериментальные данные по ударному сжатию и изоэнтропическому расширению веществ при высоких плотностях энергии. – Черногловка: Институт химической физики в Черногловке РАН, 1996.
149. *Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В.*, Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ / Под ред. Р.Ф. Трунина. – Саров: Российский федеральный ядерный центр ВНИИЭФ, 2001.
150. *Владимиров А., Волошин Н., Ногин В. и др.*, Ударная сжимаемость алюминия при давлении  $p \geq 1$  Гбар // *Письма в ЖЭТФ*. – 1984, том 39, с. 69–72.
151. *Liquornik D. J.*, Digitized data for Delco test 4007, lead-on-lead: Rep.: DDV-86-0010 / Lawrence Livermore Laboratory, 1986.
152. *Сапожников А.Т., Першина А.В.*, Полуэмпирическое уравнение состояния металлов в широком диапазоне плотностей и температур // *ВАНТ*, сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. – 1979, том 3, № 4(6), с. 47-56.
153. *Sjostrom T., Crockett S., Rudin S.*, Multiphase aluminum equations of state via density functional theory // *Phys. Rev. B*. – 2016, vol. 94, 144101.
154. *Барышева Н.М., Жеребцов В.А., Синько Г.А.*, САУРС -



- широкодиапазонное уравнение состояния с использованием сплайн-аппроксимации // ВАНТ, сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. – 1988, том 15, № 2, с. 80-86.
- 155.** Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. Кикоина К.К. – М.: Энергоатомиздат, 1976.
- 156.** *Robert Kargon and Peter Achinstein, Kelvin's Baltimore Lectures and Modern Theoretical Physics: historical and philosophical perspectives.* – Cambridge, Massachusetts: MIT Press, 1987– ISBN 0-262-11117-9.
- 157.** *Reynolds O., An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels* // Phil. Trans. R. Soc. Lond. – 1883, vol. 174, p. 935-982.
- 158.** *Richardson L.F., The supply of energy from and to atmospheric eddies* // Proc. Roy. Soc. London. – 1920, vol .97A, p. 354-373.
- 159.** *Колмогоров А.Н., Локальная структура турбулентности в несжимаемой жидкости при очень больших числах Рейнольдса* // Докл. АН СССР. – 1941, том 30, № 4, с. 299-303.
- 160.** *Обухов А.М., О распределении энергии в спектре турбулентного потока* // Изв. АН СССР. Сер. геогр. и геофиз. – 1941, том 5, № 4, с. 453–466.
- 161.** *Belotserkovskii O.M., в сб. «Numerical Methods in Fluid Dynamics», под ред. Н.Ж.Wirz, J.J.Smolderen* // Hemisphere, Washington-London. – 1978. – 339 с.
- 162.** *Belotserkovskii O.M., Turbulence and instabilities* // Lewinstoon-Quinston-Lamper. – 2000.
- 163.** *Белоцерковский О.М., Опарин А.М., Четкин В.М., Физические процессы развития сдвиговой турбулентности* // ЖЭТФ. – 2004, том 126, вып. 3(9), с. 577-584.
- 164.** *Белоцерковский О.М., Опарин А.М., Численный эксперимент: от порядка к хаосу*, Изд. 2-е, доп. – М.: Наука, 2000.
- 165.** *Fortova S.V., Investigation of spectrum characteristics of the vortex cascades in shear flow* // Physica Scripta. – 2013, vol.155, 014049–014051.
- 166.** *Фортובה С.В., Численное моделирование трехмерного течения Колмогорова для сдвигового слоя* // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2013, том 53, № 3, с. 433–441.

167. *Фортова С.В.*, Вихревой каскад неустойчивостей и переход к турбулентности // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2014, том 54, № 3, с. 168-176.
168. *Белоцерковский С.М., Скобелев Б.Ю.*, Метод дискретных вихрей и турбулентность. – Новосибирск: ИТПМ, 1993. – 38 с.
169. *Белоцерковский С.М., Гиневский А.С.*, Моделирование турбулентных струй и следов на основе метода дискретных вихрей. – М.: Физматлит, 1995. – 367 с.
170. *Michael M. Rogers and Robert D. Moser*, The three-dimensional evolution of a planemixing layer: the Kelvin–Helmholtz rollup //Journal of Fluid Mechanics. – 1992, vol. 243, pp. 183-226.
171. *Robert D. Moser and Michael M. Rogers*, The three-dimensional evolution of a plane mixing layer: pairing and transition to turbulence //Journal of Fluid Mechanics. – 1993, vol.247, pp. 275-320.
172. *Бетчелор Дж.К.*, Теория однородной турбулентности. – М.: Изд-во иностр. лит, 1955.
173. *Фрик П.Г.*, Турбулентность: модели и подходы. Курс лекций. Часть 2. – Пермь, 1999. – 136 с.
174. *Конт-Белло Ж.*, Турбулентное течение в канале с параллельными стенками. – М.: Мир, 1968. – 176 с.
175. *Обухов А.М.*, Течение Колмогорова и его лабораторное моделирование // УМН. – 1983, том 38(4), с. 101-111.
176. *Арнольд В.И., Мешалкин Л.Д.*, Семинар А.Н.Колмогорова по избранным вопросам анализа (1958-1959) // УМН. – 1960, том 15, № 1, с. 247-250.
177. *Гледзер Е.Б., Должанский Ф.В., Обухов А.М.*, Системы гидродинамического типа и их применение. – М.: Наука, 1981.
178. *Мешалкин Л.Д., Синай Я.Г.*, Исследование устойчивости стационарного решения одной системы уравнений плоского движения несжимаемой вязкой жидкости // ПММ. – 1961, том 25, вып. 6, с. 1140-1143.
179. *Юдович В.И.*, О неустойчивости параллельных течений вязкой несжимаемой жидкости относительно пространственно- периодических возмущений // Числ. методы решения задач матем. физики. – М.: Наука, 1966, с. 242-249.

- 180.** *Кляцкин В.И.*, К нелинейной теории устойчивости периодических течений // Прикл. матем. и механ. – 1972, том 36, вып. 2, с. 263-371.
- 181.** *Белоцерковский С.О., Мирабель А.П., Чусов М.А.*, О построении закритического режима для плоского периодического течения // Изв. АН СССР. Физ. атмосф. и океана. – 1978, том 14, № 1, с. 11-20.
- 182.** *Kraichnan R.H.*, Inertial Ranges in Two-Dimensional Turbulence // Phys. Fluids. – 1967, vol. 10, p. 1417.
- 183.** *Boffetta G., Ecke R.E.*, Two-Dimensional Turbulence // Rev. Fluid Mech. – 2012, vol. 44, pp. 427-451.
- 184.** *Kraichnan R.H., Montgomery D.*, Two-dimensional turbulence // Rep. Prog. Phys. – 1980, vol. 43, pp. 547-619.
- 185.** *Sommeria J.*, J. Experimental study of the two-dimensional inverse energy cascade in a square box. Fluid Mech. – 1986, vol. 170, pp. 139-168.
- 186.** *Smith L.M., Yakhot V.*, Finite-size effects in forced two-dimensional turbulence // J. Fluid Mech. – 1994, vol. 274, pp. 115-138.
- 187.** *Boffetta G., Celani A., Vergassola M.*, Inverse energy cascade in two-dimensional turbulence: Deviations from Gaussian behavior // Phys. Rev. – 2000, E 61, R29.
- 188.** *Chertkov M., Connaughton C., Kolokolov I., Lebedev V.*, Dynamics of Energy Condensation in Two-Dimensional Turbulence // Phys. Rev. Lett. – 2007, vol. 99, 084501.
- 189.** *Falkovich G.*, J. Phys. A: Symmetries of the turbulent state. Math. Theor. – 2009, vol. 42, 123001.
- 190.** *Kolokolov I.V., Lebedev V.V.*, Profile of coherent vortices in two-dimensional turbulence // JETP Lett. – 2015, 101:3, pp. 164-167.
- 191.** *Kolokolov I.V., Lebedev V.V.*, Velocity statistics inside coherent vortices generated by the inverse cascade of 2-D turbulence // J. Fluid Mech. – 2016, 809, R2-1.
- 192.** *Xia H., Shats M., Falkovich G.*, Spectrally condensed turbulence in thin layers // Phys. Fluids. – 2009, vol. 21, 125101.
- 193.** *Laurie J., Boffetta G., Falkovich G., Kolokolov I., Lebedev V.*, Universal Profile of the Vortex Condensate in Two-Dimensional Turbulence // Phys. Rev. Lett. – 2014, vol. 113, 254593.

- 194.** *Фортова С.В., Опарина Е.И., Трошкин О.В., Белоцерковская М.С.,* Численное моделирование течения Колмогорова под действием периодического поля внешней силы // Тезисы докладов Всероссийской научной конференции с элементами школы молодых ученых «Теплофизика и физическая гидродинамика», г. Ялта, 10 – 27 сентября 2018 г. – Новосибирск: Изд-во Института теплофизики СО РАН, 2018 – с. 167.
- 195.** *Fortova S. V., Oparina E.I., Belotserkovskaya M.S.,* Numerical simulation of the Kolmogorov Flow under the influence of the periodic field of the external force // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2018, vol. 1128, 084501.
- 196.** *Дерибас А.А.,* Физика упрочнения и сварки взрывом. Новосибирск: Наука, 1972. – 188 с.
- 197.** *Яковлев И.В.,* Неустойчивость границы раздела соударяющихся поверхностей металлов // *ФГВ.* – 1973, том 9, № 3, с. 447.
- 198.** *Годунов С.К., Дерибас А.А., Козин Н.С.,* Волнообразование при сварке взрывом // *Журн. прикл. мех. и техн. физики.* – 1971, №3, с. 63-72.
- 199.** *Дерибас А.А., Захаров В.С., Соболенко Т.М., Тесленко Т.С.,* О переносе поверхностного рельефа в металлах ударными волнами // *Физика горения и взрыва.* – 1974, том 10, № 6, с. 931.
- 200.** Волнообразование при косых соударениях: Сб. статей (под ред. Яковлев И.В., Кузьмин Г.Е., Пай В.В.) – Новосибирск: Изд-во Института дискрет. матем. и информатики, 2000. – 221 с.
- 201.** *Демченко В.В., Сергеев В. А.,* Неустойчивость поверхности соударения при высокоскоростном ударе // *МЖГ.* – 2003, № 6, с. 11-121.
- 202.** *Бабкин А.В.,* Численные методы в задачах физики быстропротекающих процессов. М.: Изд-во МГТУ им. Баумана, 2006. – 520 с.
- 203.** *Белоцерковский О.М., Фортова С.В., Трошкин О.В., Пронина А.П., Ериклинцев И.В., Козлов С.А.,* Численное моделирование высокоскоростного столкновения металлических пластин // *Математическое моделирование.* – 2016, том 28, № 2, с. 19-30.
- 204.** *Канель Г.И., Разоренов С.В. и др.,* Ударные волны в физике конденсированного вещества // *УФН.* – 2007, том 177, с. 809-830.

- 205.** *Lomonosov I.V. and Fortova S.V.*, Wide-Range Semiempirical Equations of State of Matter for Numerical Simulation on High-Energy Processes // *High Temperature*. – 2017, vol. 55, № 4, pp. 585-610.
- 206.** *Ким В.В.*, Численное моделирование газодинамических процессов при высоких плотностях энергии модифицированным методом индивидуальных частиц // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математической наук. – Черногоровка, 2005. – 131 с.
- 207.** *Ким В.В. и др.*, Расчет волновых взаимодействий и термодинамического состояния многослойных мишеней при одномерном ударном нагружении до 150 Гпа // 11-е Забабахинские чтения. – РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, Россия, 2012.
- 208.** *Fortova S.V., Utkin P.S., Shepelev V.V.* Application of software complex turbo problem solver to Rayleigh-Taylor instability modeling // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2016. – vol. 754. – Paper 062003.
- 209.** *Fortova S.V., Utkin P.S., Narkunas T.S., Shepelev, V.V.* Numerical simulation of the impact of high-speed metallic plates using two approaches // *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series*. – 2017. – vol. 899. – Paper 052006.
- 210.** *Fortova S.V., Utkin P.S., Pronina A.P., Narkunas T.S., Shepelev V.V.* Improvement of three-dimensional mathematical for the simulation of impact of high-speed metallic plates // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018. – vol. 946. – Paper 012052.
- 211.** *Utkin P.S., Fortova S.V.* Numerical modeling of dense flows of two-phase media with shock waves using two-fluid model // *AIP Conference Proceedings*. – 2018. – vol. 2027. – Paper 030107.
- 212.** *Уткин П.С., Фортова С.В.* Двухжидкостная модель высокоскоростного соударения металлических пластин // *Горение и взрыв*. – 2018. – Т. 11, № 4. с. 118-124.
- 213.** *Уткин П.С., Фортова С.В.* Математическое моделирование высокоскоростного взаимодействия металлических пластин в рамках двухжидкостного Эйлера подхода // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. – 2018. – том 58, № 8. с. 90-96.
- 214.** *Фортова С.В., Уткин П.С., Казакова Т.С.* Трехмерное численное моделирование развития неустойчивости контактной границы сталкивающихся металлических пластин в газодинамическом

- приближении // Теплофизика высоких температур. – 2019. – том 57, № 2. с. 262-268.
- 215.** *Fortov V.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R., Lomonosov I.V.*, Wide-range multi-phase equations of state for metals // *Nuc. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. A.* – 1998, vol. 415, p. 604.
- 216.** Shock wave database. Электронный ресурс, режим доступа: <http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>.
- 217.** *Glaister P.* An approximate linearised Riemann solver for the Euler equations for real gases // *J. Comp. Phys.* – 1988, vol. 74, p. 382.
- 218.** *Bonse J., Hohm S., Kirner S.V., Rosenfeld A. and Kriiger J.*, Laser-induced periodic surface structures - a scientific evergreen // *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* – 2017, vol. 23(3), 9000615.
- 219.** *Завестовская И. Н.*, Лазерное наноструктурирование поверхности материалов // *Квантовая электроника.* – 2010, том 40, №. 11, с. 942-954.
- 220.** *Bolme C.A., McGrane S.D., Moore D.S. and Funk D.J.*, Single shot measurements of laser driven shock waves using ultrafast dynamic ellipsometry // *Journal of Applied Physics.* – 2007, vol. 102, 033513.
- 221.** *Korte F., Koch J., Chichkov B.N.*, Formation of Microbumps and Nanojets on Gold Targets by Femtosecond Laser Pulses // *Appl. Phys. A.* – 2004, vol. 79, pp. 879–881.
- 222.** *Nakata Y., Okada T., and Maeda M.*, Nano-sized hollow bump array generated by single femtosecond laser pulse // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 2003, vol. 42, L1452–L1454.
- 223.** *Nakata Y., Miyanaga N. and Okada T.*, Effect of pulse width and fluence of femtosecond laser on the size of nanobump array // *Appl. Surf. Sci.* – 2007, vol. 253(15), pp. 555-6557.
- 224.** *Nakata Y., Miyanaga N., Momoo K. and Hiromoto T.*, Solid-liquid-solid process for forming free-standing gold nanowhisker superlattice by interfering femtosecond laser irradiation // *Appl. Surf. Sci.* – 2013, vol. 274, pp. 27-32.
- 225.** *Kuznetsov A.I., Koch J. and Chichkov B.N.*, Laser-induced backward transfer of gold nanodroplets // *Opt. Express.* – 2009, vol. 17 (21), pp. 18820-18825.

- 226.** *Nakata Y., Tsuchida K., Miyanaga N., and Furusho H.*, Liquidly process in femtosecond laser processing // *Appl. Surf. Sci.* – 2009, vol. 255 (24), pp. 9761-9763.
- 227.** *Unger C., Koch J., Overmeyer L. and Chichkov B.N.*, Time-resolved studies of femtosecond-laser induced melt dynamics // *Opt. Express.* – 2012, vol. 20 (22), pp. 24864-24872.
- 228.** *Meshcheryakov Y. and Bulgakova N.*, Thermoelastic modeling of microbump and nanojet formation on nanosize gold films under femtosecond laser irradiation // *Applied Physics A.* – 2006, vol. 82, 363.
- 229.** *Meshcheryakov Y.P., Shugaev M.V., Mattie T., Lippert T. and Bulgakova N.M.*, Role of thermal stresses on pulsed laser irradiation of thin films under conditions of microbump formation and nonvaporization forward transfer // *Applied Physics A.* – 2013, vol. 113, pp. 521-529.
- 230.** *Ivanov D.S., Kuznetsov A.I, Lipp V.P., Rethfeld B., Chichkov B.N., Garcia M.E., Schulz W.*, Short laser pulse nanostructuring of metals: direct comparison of molecular dynamics modeling and experiment // *Appl. Phys. A.* – 2013, vol.111, pp. 675-687.
- 231.** *Ivanov D.S., Blumenstein A., Ihlemann J, Simon P, Garcia M.E. and Rethfeld B.*, Molecular dynamics modeling of periodic nanostructuring of metals with a short UV laser pulse under spatial confinement by a water layer // *Applied Physics A.* – 2017, vol. 123, 744.
- 232.** *Domke M., Rapp S., Schmidt M. and Huber H.P.*, Ultrafast pump-probe microscopy with high temporal dynamic range // *Optics Express.* – 2012, vol. 20, № 9, pp. 10330-10338.
- 233.** *Rouleau C.M., Shih C.Y., Wu C, Zhigilei L.V., Puretzky A.A. and Geohegan D.B.*, Nanoparticle generation and transport resulting from femtosecond laser ablation of ultrathin metal films: Time-resolved measurements and molecular dynamics simulations // *Appl. Phys. Lett.* – 2014, vol. 104, 193106.
- 234.** *Shih C.Y., Wu C., Shugaev M.V. and Zhigilei L.V.*, Atomistic modeling of nanoparticle generation in short pulse laser ablation of thin metal films in water // *Journal of Colloid and Interface Science.* – 2017, vol. 489, pp. 3-17.
- 235.** *Inogamov N.A. and Zhakhovskii V.V.*, Formation of nanojets and nanodroplets by an ultrashort laser pulse at focusing in the diffraction limit // *JETP Letters.* – 2014, vol. 100, pp. 4-10.

- 236.** *Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V. and Khokhlov V.A.*, Jet formation in spallation of metal film from substrate under action of femtosecond laser pulse // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* – 2015, vol. 120, pp.15-48.
- 237.** *Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V., Khokhlov V.A., Petrov Y.V. and Migdal K.P.*, Solitary nanostructures produced by ultrashort laser pulse // *Nanoscale research letters.* – 2016, vol. 11 (1), p. 177.
- 238.** *Anisimov S.I., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.A., Murzov S.A. and Khokhlov V.A.*, Formation and crystallisation of a liquid jet in a film exposed to a tightly focused laser beam // *Quantum Electronics.* – 2017, vol. 47 (6), p. 509.
- 239.** Wang X.W., Kuchmizhak A.A., Li X., Juodkazis S., Vitrik O.B., Kulchin Yu.N., Zhakhovsky V.V., Danilov P.A., Ionin A.A., Kudryashov S.I., Rudenko A.A. and Inogamov N.A., Laser-Induced Translative Hydrodynamic Mass Snapshots: Noninvasive Characterization and Predictive Modeling via Mapping at Nanoscale // *Phys. Rev. Applied.* – 2017, vol. 8, 044016.
- 240.** *Chen L., Zhai T., Zhang X., Unger C., Koch J., Chichkov B.N. and Klar P.J.*, Polarization-dependent SERS effects of laser-generated sub-100 nm antenna structures // *Nanotechnology.* – 2014, vol. 25, № 26.
- 241.** *Kuchmizhak A.A., Gurbatov S., Vitrik O. and Kulchin Y.*, Plasmon mode excitation and photoluminescence enhancement on silver nanoring // *Optics Communications.* – 2015, vol. 356, pp. 1-6.
- 242.** *Zywietz U., Evlyukhin A.B., Reinhardt C. and Chichkov B.N.*, Laser printing of silicon nanoparticles with resonant optical electric and magnetic responses // *Nature Communications.* – 2014, vol. 5, 3402.
- 243.** Kuchmizhak A., Vitrik O., Kulchin Y., Storozhenko D., Mayor A., Mirochnik A., Makarov S., Milichko V., Kudryashov S., Zhakhovsky V. and Inogamov N., Laser printing of resonant plasmonic nanovoids // *Nanoscale.* – 2016, vol. 8, pp. 12352-12361.
- 244.** *Kuchmizhak A.A., Ionin A.A., Kudryashov S.I., Makarov S.V., Rudenko A.A., Kulchin Yu.N., Vitrik O.B. and Efimov T.V.*, Flash-imprinting of intense femtosecond surface plasmons for advanced nanoantenna fabrication // *Optics Letters.* – 2015, vol. 40, № 8, pp. 1687-1690.
- 245.** *Povarnitsyn M.E., Andreev N.E., Apfelbaum E.M., Itina T.E., Khishchenko K.V., Kostenko O.F., Levashov P.R. and Veysman M.E.*, A wide-range model



- for simulation of pump-probe experiments with metals // *Applied Surface Science*. – 2012, vol. 258, № 23, 15, pp. 9480-9483.
- 246.** *Ashitkov S.I., Komarov P.S., Struleva E.V., Agranat M.B., Kanel G.I. and Khishchenko K.V.*, The behavior of tantalum under ultrashort loads induced by femtosecond laser // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2015, vol. 653, 012001.
- 247.** *Romashevskiy S., Ashitkov S., Ovchinnikov A., Kondratenko P. and Agranat M.*, Formation of periodic mesoscale structures arranged in a circular symmetry at the silicon surface exposed to radiation of a single femtosecond laser pulse // *Applied Surface Science*. – 2016, vol. 374, pp. 12-18.
- 248.** *Povarnitsyn M.E., Levashov P.R., Khishchenko K.V.*, High-Power Laser Ablation // *Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE)*. – 2008, vol. 7005, № 1-2, pp. 508-508.
- 249.** *Stegailov V. and Zhilyaev P.*, Pressure in Electronically Excited Warm Dense Metals // *Contrib. Plasma Phys.* – 2015, vol. 55, pp. 164-171
- 250.** *Povarnitsyn M.E., Fokin V.B., Levashov P.R.*, Microscopic and Macroscopic Modeling of Femtosecond Laser Ablation of Metals // *Applied Surface Science*. – 2015, vol. 357:A, pp. 1150–1156.
- 251.** *Norman G.E., Starikov S.V. and Stegailov V.V.*, Atomistic simulation of laser ablation of gold: Effect of pressure relaxation // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2012, vol. 114, pp.792-800.
- 252.** *Ashitkov S.I., Komarov P.S., Struleva E.V., Inogamov N.A., Agranat M.B.*, Laser ablation of tantalum, two-temperature physics and strength of melt // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2018, vol. 946, 012002 .
- 253.** *Vorobyev A.Y. and Guo C.*, Femtosecond laser nanostructuring of metals // *Opt. Express*. – 2006, vol. 14, № 6, pp. 2164-2169.
- 254.** *Fang R, Vorobyev A and Guo C.*, Direct visualization of the complete evolution of femtosecond laser-induced surface structural dynamics of metals // *Light: Science & Applications*. – 2017, vol. 6, el6256.
- 255.** *Ashitkov S.I., Inogamov N.A., Zhakhovskii V.V., Emirov Y.N., Agranat M.B., Oleinik I.I., Anisimov S.I., Fortov V.E.*, Formation of nanocavities in the surface layer of an aluminum target irradiated by a femtosecond laser pulse // *JETP Lett.* – 2012, vol. 95, pp. 176-181.
- 256.** *Geras'kin A.A., Khishchenko K.V., Krasnyuk I.K., Pashinin P.P., Semenov A.Yu. and Vovchenko V.I.*, Specific Features of Spallation Processes in

- Polymethyl Methacrylate Under High Strain Rate // 2009 Contrib. Plasma Phys. – 2009, vol. 49, № 7-8, pp. 451-454.
- 257.** *Abrosimov S.A., Bazhulin A.P., Bol'shakov A.P., Konov V.I., Krasnyuk I.K., Pashinin P.P., Ral'chenko V.G., Semenov A.Y., Sovyk D.N., Stuchebryukhov I.A., Fortov V.E., Khishchenko K.V. and Khomich A.A.*, Extreme light fields and their applications // Quantum Electron. – 2014, vol.44, № 6, pp. 530-534.
- 258.** *Krasnyuk I.K., Pashinin P.P., Semenov A.Yu., Khishchenko K.V. and Fortov V.E.*, Study of extreme states of matter at high energy densities and high strain rates with powerful lasers // Laser Physics. – 2016, vol. 26, № 9.
- 259.** *Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. and Khokhlov V.A.*, Laser ablation caused by geometrically constrained illumination and inventive target design // Journal of Physics: Conf. Series. – 2018, vol. 946, 012008.
- 260.** *Луфшиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В.*, К теории релаксационных изменений в металлах // Атомная энергия. – 1959, том 6, с. 391-402.
- 261.** *Ashitkov S.I., Komarov P.S., Zhakhovsky V.V., Petrov Yu.V., Khokhlov V.A., Yurkevich A.A., Ilnitsky D.K., Inogamov N.A. and Agranat M.B.*, Ablation of gold irradiated by femtosecond laser pulse: Experiment and modeling // Journal of Physics: Conference Series. – 2016, vol. 774, № 1.
- 262.** *Shepelev V.V. and Inogamov N.A.*, Two-dimensional turning of thermal flux from normal to lateral propagation in thin metal film irradiated by femtosecond laser pulse // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 946, 012010.
- 263.** *Shepelev V.V., Inogamov N.A., Fortova S.V., Danilov P.A., Kudryashov S.I., Kuchmizhak A.A., Vitrik O.B.*, Action of a femtosecond laser pulse on thin metal film supported by glass substrate // Journal of Physics: Conference Series. – 2018, vol. 1128, 012092.
- 264.** *Шепелев В.В., Фортова С.В., Опарина Е.И.*, Использование программного комплекса Turbulence Problem Solver (TPS) для численного моделирования взаимодействия лазерного излучения с металлами // Компьютерные исследования и моделирование. – 2018, том 10, № 5, с. 619-630.
- 265.** *Shepelev V.V., Inogamov N.A., Fortova S.V.*, Thermal and dynamic effects of laser irradiation of thin metal films // Optical and Quantum Electronics. – 2020, vol. 52(2), 88.

- 266.** *Shepelev V.V. and Inogamov N.A.*, Density from 1 to 100 ps (continuous color banding) // <https://www.youtube.com/watch?v=TI09nMubgww> – 2018.
- 267.** *Shepelev V.V. and Inogamov N.A.*, Pressure from 1 to 100 ps (continuous color banding) // <https://www.youtube.com/watch?v=5fQHFuWImek> – 2018.
- 268.** *Shepelev V.V. and Inogamov N.A.*, Pressure from 0 to 100 ps in sharper color banding // <https://www.youtube.com/watch?v=Xkj1-UGr21g> – 2018.
- 269.** *Inogamov N.A. and Zhakhovsky V.V.*, Surface 3D nanostructuring by tightly focused laser pulse: simulations by Lagrangian code and molecular dynamics // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2016, vol. 681, 012001.
- 270.** *Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V. and Migdal K.P.*, Laser-induced spalling of thin metal film from silica substrate followed by inflation of microbump // *Applied Physics A.* – 2016, vol. 122, 432.
- 271.** *Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Anisimov S.I., Oparin A.M., Shaposhnikov N.V., von der Linde D. and Meyer-ter-Vehn J.*, Expansion of matter heated by an ultrashort laser pulse // *JETP Letters.* – 1999, vol. 69, № 4, pp. 310-316.
- 272.** *Li Q., Alloncle A.P., Grojo D. and Delaporte P.*, Laser-induced nano-jetting behaviors of liquid metals // *Applied Physics A.* – 2017, vol. 123, 718.
- 273.** *Kuchmizhak A.A., Nepomnyashchii A.V., Vitrik O.B. and Kulchin Yu.N.*, Plasmon-mediated enhancement of Rhodamine 6G spontaneous emission on laser-spalled nanotextures // *Physics Procedia.* – 2017, vol. 86, pp.66-71.
- 274.** *Khokhlov V.A., Inogamov N.A., Zhakhovsky V.V., Shepelev V.V., Il'nitsky D.K.*, Thin 10-100 nm film in contact with substrate: Dynamics after femtosecond laser irradiation // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2015, vol., 653, 012003.
- 275.** Вопросы теории взрывчатых веществ (ред. Харитон Ю.Б., Ратнер С.Б.) – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1947, вып. I, кн. 1. – 188 с.