

ISSN 0367-5203

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ И
ТЕХНИКИ

**Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ**

СЕРИЯ

**Математическое моделирование
физических процессов**

2012

ВЫПУСК 2

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 2

Издается с 1978 г.

Саров — 2012

Главный редактор Р. М. Шагалиев

Редакционная коллегия:

Ю. Г. Бартенев (ВНИИЭФ), Ю. А. Бондаренко (ВНИИЭФ) — зам. главного редактора,
А. Н. Быков (ВНИИЭФ), Н. Н. Залялов (ВНИИЭФ), А. Д. Зубов (ВНИИТФ),
Н. В. Иванов (ВНИИЭФ), В. Л. Ковалев (МГУ), М. Ю. Козманов (ВНИИТФ),
В. Е. Неуважаев (ВНИИТФ), Е. В. Соколовская (ВНИИЭФ) — ответственный секретарь,
А. А. Соловьев (ВНИИЭФ), В. Ф. Спиридонов (ВНИИЭФ),
В. Ф. Тишкин (ИММ РАН) — зам. главного редактора, А. А. Холостов (ВНИИЭФ),
А. Н. Чекалин (Казанский ГУ), В. Н. Чубариков (МГУ)

УДК 519.6

АЛГОРИТМЫ СГЛАЖИВАНИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ПОЛЯ СКОРОСТЕЙ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К РАСЧЕТАМ ПО МЕТОДИКЕ Д

Ю. Д. Чернышев, М. А. Одинцова, О. О. Муругова
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Описываются алгоритмы квадратичного и нового линейного сглаживания скоростей, реализованные в рамках методики Д. Дается описание трех алгоритмов пересчета внутренней энергии, необходимых для сохранения полной энергии. Для устранения возмущений поля скоростей, так называемых *песочных часов*, предложены алгоритм определения таких возмущений (*плохих* ячеек), а также критерий увеличения коэффициентов линейного углового и контурного сглаживания, необходимый для устранения плохих ячеек.

Приводятся результаты тестовых расчетов с использованием предложенных алгоритмов.

Ключевые слова: методика Д, газодинамика, сглаживание скоростей, устойчивость, расчеты двумерных задач.

Введение

Известно, что во многих численных методиках, предназначенных для расчета многомерных задач механики сплошной среды на структурированных счетных сетках, в том числе в методике Д [1], используются операторы сглаживания поля скоростей [2–4]. Без использования подобных операторов в процессе счета могут возникать искажения лагранжевой и лагранжево-эйлеровой аппроксимирующих сеток (в статье [3] отмечается, что иногда возникает необходимость в использовании операторов сглаживания и на эйлеровых сетках), приводящие к потере точности, падению шага интегрирования по времени и, как следствие, к незапланированному снятию задач со счета. Устранение отмеченных недостатков является актуальной задачей в связи с возрастающими требованиями к точности и безаварийности расчетов.

В настоящее время в методике Д используются алгоритмы углового и контурного сглаживания скоростей в узлах сетки (по строкам и столбцам). Эти алгоритмы являются неким аналогом контурных и угловых вязкостей, которые были введены в разностную схему методики Д в 60-е годы XX века Н. А. Дмитриевым и Л. В. Дмитриевой [5]. Угловое сглаживание препятствует

образованию перехлестов между линиями сетки, а контурное — обращению в нуль расстояния между линиями сетки. Операторы этих типов сглаживания имеют квадратичную зависимость от скорости, поэтому в последующем изложении будем называть такое сглаживание квадратичным.

Алгоритмы квадратичного сглаживания хорошо себя зарекомендовали и успешно применяются в методике Д на протяжении последних 30 лет. Но с развитием вычислительной техники, внедрением вычислительных систем с распределенной памятью, обеспечивающих счет в *параллельном* режиме, наблюдается тенденция перехода к все более подробным счетным сеткам. В связи с этим в расчетах увеличивается спектр возмущений, которых при меньшем числе точек в решении не было. При проведении расчетов в рамках методики Д было обнаружено, что имеющийся аппарат квадратичного сглаживания малоэффективен при некоторых типах возмущений поля скоростей, например при так называемых возмущениях *песочные часы* и длинноволновых возмущениях на контактной границе (КГ). Поэтому возникла необходимость введения нового линейного сглаживания скоростей на основе уже имеющегося квадратичного, которое было

бы эффективным и при указанных выше возмущениях. Линейное сглаживание вводится посредством замены модуля разности скоростей в операторах квадратичного сглаживания местной скоростью звука a_0 .

При разработке алгоритмов сглаживания важными требованиями являлись сохранение полной энергии в задачах, улучшение состояния расчетной сетки, повышение безавостности расчетов. Кроме того, необходимо было исключить отрицательное влияние сглаживания на физические возмущения, определяемые характером процесса, т. е. не ухудшить точность расчетов.

Алгоритмы сглаживания

Алгоритм углового сглаживания скоростей. Рассмотрим алгоритм углового сглаживания, например, по строке 5-0-1 счетной сетки, изображенной на рис. 1.

Добавка к скорости \vec{U}_0 от квадратичного и линейного углового сглаживания направлена по нормали \vec{N} к линии сетки и вычисляется по формуле

$$\Delta \vec{U}_0 = \begin{cases} c_{\text{кв.у}} \frac{\tau \dot{\varphi} (|\dot{\varphi}| + d)}{\sin^2 \frac{\varphi}{2}} \vec{N}, & \text{если } \dot{\varphi} \sin \varphi < 0; \\ 0, & \text{если } \dot{\varphi} \sin \varphi \geq 0. \end{cases}$$

Здесь $c_{\text{кв.у}}$ — коэффициент квадратичного углового сглаживания; τ — временной шаг; φ — величина угла в узле 0; $\dot{\varphi}$ — так называемая угловая скорость; $d = c_{\text{лин.у}} a_0 / r_{15}$ — линейная добавка, где $c_{\text{лин.у}}$ — коэффициент линейного углового сглаживания, r_{15} — длина отрезка 15, a_0 — скорость звука в узле 0; $\vec{N} = (y_5 - y_1, x_1 - x_5)$ — вектор нормали к линии сетки в узле 0.

Оператор квадратичного углового сглаживания имеет порядок малости τh^3 , а оператор линейного сглаживания — τh . Положительным

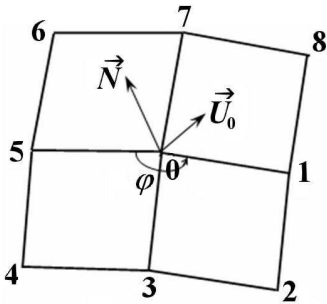


Рис. 1. Счетный шаблон для углового сглаживания поля скоростей

свойством таких операторов является то, что при стремлении временного шага τ к нулю добавка к скорости также стремится к нулю.

Рассмотрим в разностях угловое сглаживание вдоль строки 5-0-1. В этом случае при определении добавки к скорости $\Delta \vec{U}_0$ в узле 0 (см. рис. 1) используются скорости в узлах 5, 0, 1 (при сглаживании вдоль столбца рассматриваются узлы 3, 0, 7).

Угловые скорости отрезков 01 и 05, равные $\dot{\varphi}_{01}$ и $\dot{\varphi}_{05}$ соответственно, вычисляются по формулам

$$\dot{\varphi}_{01} = \frac{(x_1 - x_0)(v_1 - v_0) - (y_1 - y_0)(u_1 - u_0)}{r_{01}^2};$$

$$\dot{\varphi}_{05} = \frac{-(x_5 - x_0)(v_5 - v_0) - (y_5 - y_0)(u_5 - u_0)}{r_{05}^2},$$

где u_i, v_i ($i = 0, 1, 5$) — компоненты векторов скоростей \vec{U}_i ; r_{01}, r_{05} — длины ребер 01 и 05 соответственно. Угловая скорость узла 0 будет равна $\dot{\varphi} = \dot{\varphi}_{01} + \dot{\varphi}_{05}$. Сглаживание скорости производится в том случае, если угол φ уменьшается и выполняется условие $\dot{\varphi} \sin \varphi < 0$.

Добавки к скоростям отрезков 01 и 05, полученные при квадратичном и линейном сглаживании, равны

$$\Delta \vec{U}_{01} = \frac{c_{\text{кв.у}} \tau \dot{\varphi}_{01} (|\dot{\varphi}| + d)}{\sin^2 \frac{\varphi}{2}} \vec{N};$$

$$\Delta \vec{U}_{05} = \frac{c_{\text{кв.у}} \tau \dot{\varphi}_{05} (|\dot{\varphi}| + d)}{\sin^2 \frac{\varphi}{2}} \vec{N}.$$

Компоненты разностной добавки $\Delta \vec{U}_0$ к скорости в узле 0 (см. рис. 1) при угловом сглаживании строки 5-0-1 будут иметь вид

$$\Delta u_0 = \Delta u_{01} + \Delta u_{05}; \quad \Delta v_0 = \Delta v_{01} + \Delta v_{05}.$$

Далее добавки $\Delta \vec{U}_0, \Delta \vec{U}_{01}, \Delta \vec{U}_{05}$ нормируются таким образом, чтобы модуль добавки не превышал заданной величины от скорости

$$|\vec{U}| = \frac{1}{3} (|\vec{U}_0| + |\vec{U}_1| + |\vec{U}_5|),$$

где \vec{U}_i ($i = 0, 1, 5$) — скорость в узле с номером i . Нормировка производится в том случае, если выполняется условие $|\Delta \vec{U}_0| / |\vec{U}| > \alpha_n$. При нормировке добавки $\Delta \vec{U}_0, \Delta \vec{U}_{01}, \Delta \vec{U}_{05}$ умножаются на $A = \alpha_n |\vec{U}| / |\Delta \vec{U}_0|$.

Закон сохранения импульса (строки 5-0-1) имеет вид

$$\sum_{i=0,1,5} m_i \vec{U}_i = \sum_{i=0,1,5} m_i \tilde{\vec{U}}_i,$$

где \vec{U}_i — скорость до сглаживания; $\tilde{\vec{U}}_i$ — сглаженная скорость. Для выполнения этого равенства вводятся специальные коэффициенты, аналогичные коэффициентам Дали [6]. При сглаживании скорости, например, по строке в узле 0 полученная добавка $\Delta \vec{U}_0$ разносится с противоположным знаком в соседние узлы (1 и 5) по формулам

$$\Delta \tilde{\vec{U}}_5 = \Delta \vec{U}_5 - a_5 \beta \Delta \vec{U}_{05}; \quad \Delta \tilde{\vec{U}}_1 = \Delta \vec{U}_1 - a_1 \beta \Delta \vec{U}_{01},$$

где $a_5 = m_0/m_5$; $a_1 = m_0/m_1$; $m_0 = (m_{0187} + m_{3210} + m_{4305} + m_{5076})/4$, m_{0187} — плоская масса ячейки, образованной узлами 0, 1, 8, 7 (остальные m — аналогично); β — постоянный коэффициент, $0,2 \leq \beta \leq 1,0$.

При использовании данного алгоритма недостаток или избыток кинетической энергии переводится во внутреннюю энергию ячеек, примыкающих к узлу 0.

Анализ устойчивости операторов квадратичного и линейного углового сглаживания скоростей методом гармоник для случая, изображенного на рис. 2, приводит к следующим ограничениям на временной шаг:

- для оператора квадратичного углового сглаживания

$$\tau < \frac{1}{8c_{\text{кв.у}} h \left| \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right|_j};$$

- для оператора линейного углового сглаживания

$$\tau < \frac{1}{2c_{\text{кв.у}} c_{\text{лин.у}} \frac{a_0}{h}};$$

- для оператора углового сглаживания при совместном использовании линейного и квадратичного алгоритмов

$$\tau < \frac{1}{2c_{\text{кв.у}} \left(4h \left| \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right|_j + c_{\text{лин.у}} \frac{a_0}{h} \right)}.$$

Следует отметить, что были получены необходимые условия устойчивости, не учитывающие

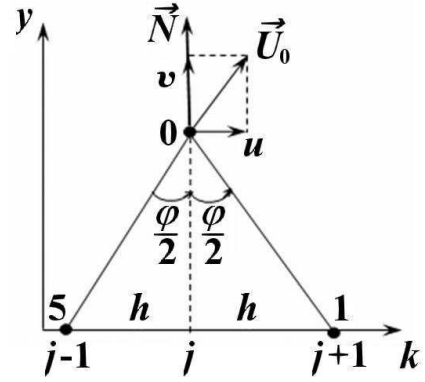


Рис. 2. Счетный шаблон для исследования устойчивости операторов углового сглаживания поля скоростей

при этом влияния линейной и квадратичной вязкостей.

Алгоритм контурного сглаживания скоростей. При контурном сглаживании используется шаблон, представленный на рис. 1. Сглаживание также производится по строке и столбцу счетной сетки.

Рассмотрим алгоритм контурного сглаживания вдоль строки 5-0-1. В этом случае при определении добавки к скорости $\Delta \vec{U}_0$ в узле 0 нормаль имеет такое же направление, что и при угловом сглаживании (см. рис. 1), но используются скорости в узлах 7, 0, 3 (при сглаживании вдоль столбца сетки рассматриваются узлы 5, 0, 1).

Добавка от контурного сглаживания к скорости в узле 0 вычисляется следующим образом:

$$\Delta \vec{U}_0 = \begin{cases} \frac{a_7 b_7 R_7 \vec{U}_{07}}{b_7 + b_3} + \frac{a_3 b_3 R_3 \vec{U}_{03}}{b_7 + b_3}, & \text{если } a_{77} b_{77} < 0 \text{ и } a_{33} b_{33} < 0; \\ \frac{a_7 b_7 R_7 \vec{U}_{07}}{b_7 + b_3}, & \text{если } a_{77} b_{77} < 0 \text{ и } a_{33} b_{33} \geq 0; \\ \frac{a_3 b_3 R_3 \vec{U}_{03}}{b_7 + b_3}, & \text{если } a_{77} b_{77} \geq 0 \text{ и } a_{33} b_{33} < 0. \end{cases} \quad (1)$$

Величины, стоящие в правых частях формулы (1), будут определены ниже. Сначала вычисляются некоторые вспомогательные величины:

$$a_{77} = \frac{\vec{N} \cdot (\vec{U}_7 - \vec{U}_0)}{|\vec{N}|^2}; \quad b_{77} = \frac{\vec{N} \cdot \vec{r}_{70}}{|\vec{N}|^2};$$

$$a_{33} = \frac{\vec{N} \cdot (\vec{U}_3 - \vec{U}_0)}{|\vec{N}|^2}; \quad b_{33} = \frac{\vec{N} \cdot \vec{r}_{30}}{|\vec{N}|^2},$$

где $\vec{N} = (y_5 - y_1, x_1 - x_5)$ — вектор нормали в точке 0; \vec{r}_{70} , \vec{r}_{30} — радиусы-векторы. Если отрезок 07 увеличивается ($a_{77}b_{77} \geq 0$), то полагается $a_{77} = 0$, $d_7 = 0$, где $d_7 = d_3 = c_{\text{лин.к}} a_0 / r_{37}$ — линейная добавка, $c_{\text{лин.к}}$ — коэффициент линейного контурного сглаживания, a_0 — скорость звука в узле 0. Аналогичные действия производятся и для отрезка 03.

Коэффициенты для контурного сглаживания b_7 , b_3 , a_7 , a_3 вычисляются следующим образом: $b_7 = |a_{77}/b_{77}|$; $b_3 = |a_{33}/b_{33}|$; $a_7 = c_a c_{\text{кв.к}} \tau \times (b_7 + d_7)$; $a_3 = c_a c_{\text{кв.к}} \tau (b_3 + d_3)$; $c_a = 0,25$, где $d_7 = d_3$ — линейная добавка, $c_{\text{кв.к}}$ — коэффициент квадратичного контурного сглаживания. a_7 и a_3 являются безразмерными параметрами, которые обеспечивают для квадратичного контурного сглаживания порядок аппроксимации τh^2 , а для линейного контурного сглаживания — τh .

Для уменьшения влияния скорости менее плотного вещества на скорость более плотного используются величины R_7 и R_3 , вычисляемые по формулам

$$R_7 = \frac{\rho_0 + \rho_3}{\rho_0 + \rho_1 + \rho_2 + \rho_3}; \quad R_3 = \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho_0 + \rho_1 + \rho_2 + \rho_3},$$

где ρ_i ($i = 0, 1, 2, 3$) — плотность ячейки.

Добавка к скорости в узле 0 представляет собой сумму добавок на отрезках 07 и 03:

$$\Delta \vec{U}_0 = \Delta \vec{U}_{07} + \Delta \vec{U}_{03},$$

где $\Delta \vec{U}_{07} = \frac{a_7 b_7 d_7 \vec{U}_{07}}{b_7 + b_3}$; $\Delta \vec{U}_{03} = \frac{a_3 b_3 d_3 \vec{U}_{03}}{b_7 + b_3}$; $\vec{U}_{07} = c_u a_{77} \vec{N}$; $\vec{U}_{03} = c_u a_{33} \vec{N}$; $c_u = 0,5$.

После вычисления добавок $\Delta \vec{U}_0$, $\Delta \vec{U}_{07}$, $\Delta \vec{U}_{03}$ производится их нормировка и разнесение импульса в точки 7 и 3 аналогично тому, как это было сделано для углового сглаживания. Недостаток или избыток кинетической энергии также переводится во внутреннюю энергию ячеек, прилегающих к узлу 0.

Анализ устойчивости операторов контурного сглаживания скоростей методом гармоник для случая, изображенного на рис. 3, приводит к следующим ограничениям на временной шаг:

— для оператора квадратичного контурного сглаживания

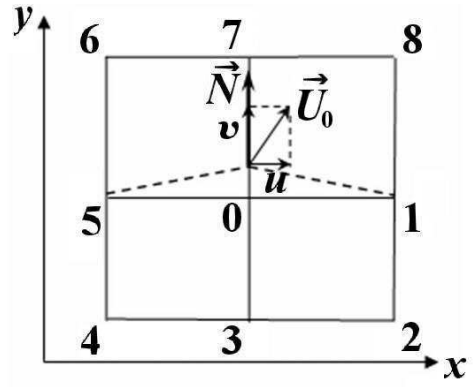


Рис. 3. Счетный шаблон для исследования устойчивости операторов контурного сглаживания поля скоростей

$$\tau < \frac{1}{C \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|_j};$$

— для оператора линейного контурного сглаживания

$$\tau < \frac{1}{c_{\text{лин.к}} C \frac{a_0}{2h}};$$

— для оператора контурного сглаживания при совместном использовании линейного и квадратичного алгоритмов

$$\tau < \frac{1}{C \left(\left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|_j + c_{\text{лин.к}} \frac{a_0}{2h} \right)},$$

где $C = c_u R_7 c_a c_{\text{кв.к}} = c_u R_3 c_a c_{\text{кв.к}}$.

Методические расчеты одномерных течений на двумерной сетке показали, что нарушение вышеприведенных условий влечет за собой счетную неустойчивость, которая приводит к несимметрии решения симметричных задач, вплоть до образования перекрестов сетки.

Алгоритмы пересчета внутренней энергии для сохранения полной энергии

Использование алгоритмов сглаживания без учета энергии часто приводит к большим значениям дисбаланса полной энергии и потере точности численного решения в задачах. Поэтому были реализованы три типа пересчета внутренней энергии.

Алгоритм 1 — стандартный. Данный алгоритм пересчета внутренней энергии является традиционным и используется во многих методах.

Для каждой ячейки (рис. 4) вычисляется изменение кинетической энергии за время действия алгоритмов сглаживания:

$$\begin{aligned} \Delta K &= K_{new} - K_{old} = \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{4} \left(\sum_i |\vec{U}_i|^2 \right) - \frac{1}{4} \left(\sum_i |\vec{U}_i|^2 \right) \right], \\ i &= 0, 1, 7, 8. \end{aligned}$$

Затем для каждой ячейки пересчитывается внутренняя энергия по формуле

$$E_{new} = E_{old} - \Delta K.$$

Данный алгоритм достаточно грубый, поэтому были предложены еще два способа учета изменения кинетической энергии в процессе сглаживания скоростей.

Алгоритм 2 — равенство градиентов давлений. Для данного способа пересчета внутренней энергии используется шаблон, изображенный на рис. 5.

Примем следующие обозначения: ΔP_i , ΔE_i ($i = 0, 1, 2, 3$) — добавки к давлению и энергии в ячейках 0, 1, 2, 3, образованных узлами 0, 1, 7, 8; 0, 1, 2, 3; 0, 3, 4, 5; 0, 5, 6, 7 соответственно.

После выполнения алгоритмов сглаживания скоростей избыток или недостаток кинетической энергии ΔK_0 переводится во внутреннюю энергию ячеек, примыкающих к узлу 0 (ΔE_0 , ΔE_1 , ΔE_2 , ΔE_3). Добавка к внутренней энергии ΔE_i ($i = 0, 1, 2, 3$) вводится таким образом, чтобы для идеального газа появляющийся градиент давления в узле 0 от сглаженных скоростей равнялся нулю. То есть должно выполняться условие

$$\Delta P_0 = \Delta P_1 = \Delta P_2 = \Delta P_3.$$

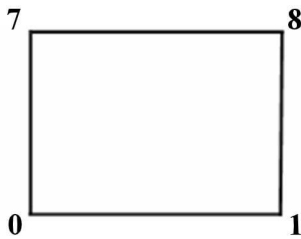


Рис. 4. Ячейка счетной сетки

Добавки к давлению ΔP_i ($i = 0, 1, 2, 3$) имеют следующий вид:

$$\Delta P_i = (\gamma - 1) (\tilde{\rho}_i^{n+1} \tilde{E}_i^{n+1} - \rho_i E_i), \quad (2)$$

где $\tilde{\rho}_i^{n+1}$, \tilde{E}_i^{n+1} — новые плотности и энергии, полученные при использовании сглаженных скоростей.

Добавки к внутренней и кинетической энергии вычисляются по формулам

$$\Delta E_i = \tilde{E}_i^{n+1} - E_i \quad (i = 0, 1, 2, 3); \quad (3)$$

$$\Delta K_0 = \frac{1}{4} (m_0 + m_1 + m_2 + m_3) \frac{|\vec{U}_0|^2 - |\vec{U}_0|^2}{2}, \quad (4)$$

где m_i ($i = 0, 1, 2, 3$) — масса ячейки.

С другой стороны, изменение кинетической энергии должно соответствовать изменению внутренней энергии. То есть

$$\Delta K_0 = m_0 \Delta E_0 + m_1 \Delta E_1 + m_2 \Delta E_2 + m_3 \Delta E_3. \quad (5)$$

Из уравнения (5), используя соотношения (2)–(4), имеем

$$\tilde{E}_0^{n+1} = \frac{\Delta K_0 - A_0}{B_0},$$

где

$$\begin{aligned} A_0 &= m_1 \frac{\rho_1 E_1 - \rho_0 E_0}{\rho_1^{n+1}} + m_2 \frac{\rho_2 E_2 - \rho_0 E_0}{\rho_2^{n+1}} + \\ &+ m_3 \frac{\rho_3 E_3 - \rho_0 E_0}{\rho_3^{n+1}} - m_0 E_0 - m_1 E_1 - \\ &- m_2 E_2 - m_3 E_3, \end{aligned}$$

$$B_0 = m_0 + m_1 \frac{\rho_0^{n+1}}{\rho_1^{n+1}} + m_2 \frac{\rho_0^{n+1}}{\rho_2^{n+1}} + m_3 \frac{\rho_0^{n+1}}{\rho_3^{n+1}}.$$

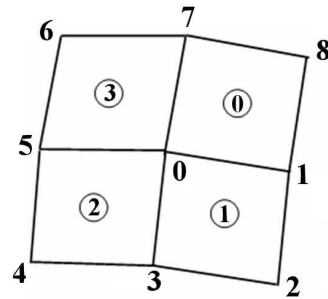


Рис. 5. Счетный шаблон для пересчета внутренней энергии

Далее энергия \tilde{E}_i^{n+1} (в ячейках $i = 1, 2, 3$) вычисляется по формуле

$$\tilde{E}_i^{n+1} = \frac{\rho_0^{n+1} \tilde{E}_0^{n+1} - \rho_0 E_0 + \rho_i E_i}{\rho_i^{n+1}}.$$

Данный алгоритм точнее первого, так как избыток или недостаток кинетической энергии распределяется между четырьмя ячейками, прилегающими к сглаживаемому узлу. Поэтому на практике рекомендуется использовать именно его.

Алгоритм 3 — энергия обратно пропорциональна плотности. Для данного способа пересчета внутренней энергии также используется шаблон, изображенный на рис. 5.

Расчет добавок к внутренней энергии для сохранения полной энергии в этом алгоритме осуществляется исходя из предположения, что энергия обратно пропорциональна плотности.

Для узла 0 по формуле (4) вычисляется изменение кинетической энергии ΔK за время действия алгоритмов сглаживания.

Далее определяется вспомогательная величина, которая учитывает площади ячеек, прилегающих к узлу 0:

$$\Delta S = \frac{m_0}{\rho_0} + \frac{m_1}{\rho_1} + \frac{m_2}{\rho_2} + \frac{m_3}{\rho_3}.$$

Для каждой из четырех ячеек, окружающих узел 0, пересчитывается внутренняя энергия по формуле

$$E_i^{n+1} = E_i^n + \frac{\Delta K}{\Delta S \rho_i} \quad (i = 0, 1, 2, 3).$$

Для многообластных задач, где в каждой области находится несколько веществ с разной плотностью, лучше применять именно этот алгоритм. В алгоритме 3 вводится специальный коэффициент, который при пересчете внутренней энергии уменьшает добавку более плотного вещества.

Возмущения песочные часы

Часто в процессе счета задач возникают возмущения поля скоростей, так называемые *песочные часы* (рис. 6). Ранее способы устранения подобного рода возмущений были описаны в работах [3, 4, 7, 8] (этот список не претендует на полноту). Авторами предложен способ определения

таких возмущений и для их преодоления указан критерий увеличения коэффициентов линейного углового и контурного сглаживания до значений, которые удовлетворяют условиям устойчивости.

Алгоритм поиска *плохих* ячеек типа *песочные часы*. Пусть на момент времени n расчетная сетка имеет вид, представленный на рис. 7,а. В момент $n + 1$ возникли осцилляции скорости, которые, не изменив объемов ячеек, изменили их форму (рис. 7,б).

Для каждой ячейки, окружающей узел 0 (см. рис. 7,а,б), например 0187, вычисляется изменение площади (относительное) по формуле

$$\Delta S_{0187} = \left| \frac{S_{0187}^{n+1} - S_{0187}^n}{S_{0187}^n} \right|.$$

Для ребер 01 и 78 (рис. 8,а) предполагаем $r_{77'}/r_{78} \simeq r_{00'}/r_{01} \simeq 0,01$, где $r_{77'} = \sqrt{(x_7 - x_{7'})^2 + (y_7 - y_{7'})^2}$.

Линейной интерполяцией определяются координаты точек $0'$ и $7'$. Для каждой *маленькой*

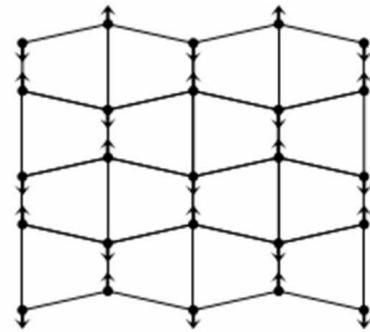


Рис. 6. Возмущения поля скоростей типа *песочные часы*

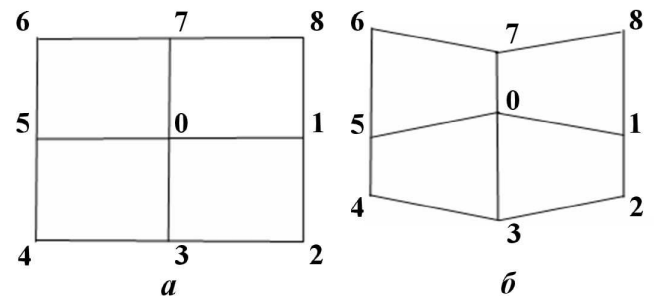


Рис. 7. Деформация счетных ячеек: а — на момент времени n ; б — на момент времени $n + 1$

ячейки (см. рис. 8, а, б), например 00'77', также вычисляем изменение площади (относительное):

$$\delta S_{7'} = \delta S_{070'7'} = \left| \frac{S_{070'7'}^{n+1} - S_{070'7'}^n}{S_{070'7'}^n} \right|.$$

Таким образом, имеем относительное изменение площади четырех *больших* ячеек, окружающих узел 0, и восьми маленьких ячеек, найденных линейной интерполяцией координат (рис. 9, а, б).

Далее вычисляется максимум из всех отношений следующего вида:

$$A = \max \left\{ \frac{\delta S_{1'} + \varepsilon}{\Delta S_0 + \varepsilon}, \frac{\delta S_{8'} + \varepsilon}{\Delta S_0 + \varepsilon}, \frac{\delta S_{2'} + \varepsilon}{\Delta S_1 + \varepsilon}, \frac{\delta S_{3'} + \varepsilon}{\Delta S_1 + \varepsilon}, \frac{\delta S_{4'} + \varepsilon}{\Delta S_2 + \varepsilon}, \frac{\delta S_{5'} + \varepsilon}{\Delta S_2 + \varepsilon}, \frac{\delta S_{6'} + \varepsilon}{\Delta S_3 + \varepsilon}, \frac{\delta S_{7'} + \varepsilon}{\Delta S_3 + \varepsilon} \right\},$$

где ΔS_i — относительные изменения площадей больших ячеек; δS_i — относительные изменения площадей маленьких ячеек; $\varepsilon = 10^{-17}$.

Ячейка считается плохой, если $A > 2$.

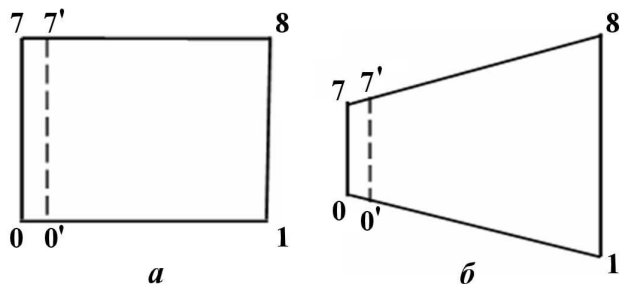


Рис. 8. Деформация счетной ячейки: а — положение точек 0' и 7' на момент времени n ; б — положение точек 0' и 7' на момент времени $n + 1$

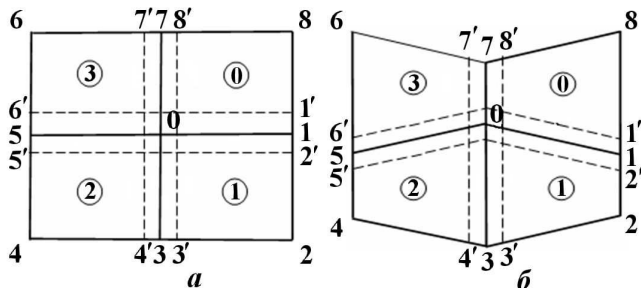


Рис. 9. Фрагмент расчетной сетки: а — на момент времени n ; б — на момент времени $n + 1$

Критерий увеличения коэффициентов линейного сглаживания. Данный критерий действует только в окрестностях узлов, которые окружают ячейки, определенные с помощью изложенного выше алгоритма.

Значение k коэффициента линейного (контурного или углового) сглаживания $c_{\text{лин}}$ выбирается в зависимости от значения n степени деформации ячейки (рис. 10).

Если $A < n_1$, то расчет производится с начальным значением коэффициента линейного сглаживания $c_{\text{лин}} = k_1$.

Если $n_1 \leq A \leq n_2$, то коэффициент сглаживания находится линейной интерполяцией между минимумом и максимумом на этом интервале:

$$c_{\text{лин}} = k_1 + (A - n_1) \frac{k_2 - k_1}{n_2 - n_1}.$$

Если $n_2 < A \leq n_3$, то $c_{\text{лин}} = k_2 + (A - n_2) \frac{k_3 - k_2}{n_3 - n_2}$.

Если $A > n_3$, то коэффициент линейного сглаживания увеличивается до $c_{\text{лин}} = k_3$.

В результате теоретических исследований и практических расчетов для газовой динамики были подобраны следующие значения коэффициента: $n_1 = 2 \div 4$; $n_2 = 4 \div 8$; $n_3 = 8 \div 12$; $k_1 = 0,005 \div 0,01$; $k_2 = 0,01 \div 0,02$; $k_3 = 0,02 \div 0,04$.

Численные расчеты газодинамических задач с учетом упругопластических свойств материалов показали, что k_i ($i = 1, 2, 3$) можно увеличить. Поэтому для расчета процесса упругопластики были выбраны следующие коэффициенты: $n_1 = 2 \div 4$; $n_2 = 4 \div 8$; $n_3 = 8 \div 12$; $k_1 = 0,01 \div 0,02$; $k_2 = 0,02 \div 0,04$; $k_3 = 0,04 \div 0,06$.

Результаты тестовых расчетов

Тест 1. Сферическая автомоделная ударная волна. Решалась задача со сферичес-

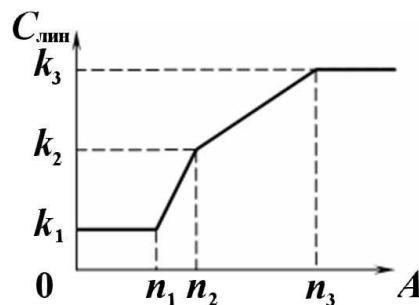


Рис. 10. Зависимость коэффициента линейного сглаживания от деформации ячейки

кой симметрией, имеющая автомодельное решение [9, 10]. Начальная геометрия представляет собой сферический сектор радиусом $R = 1$ с раствором угла 180° , разделенный КГ на две математические области, заполненные идеальным газом с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$ и плотностью $\rho_0 = 1$. Расчетная сетка строилась следующим образом: первая область разбивалась равномерно по радиусу на 40 интервалов, по углу — на 107 интервалов; вторая область по радиусу разбивалась равномерно на 40 интервалов, по углу — равномерно на 23 интервала. Граничное давление на внешней границе задавалось в зависимости от времени значениями, приведенными в [9, 10].

При описании контактирующих границ одна из них (обычно граница более тяжелого вещества) считается основной границей (*тяжелой*), а другая — соприкасающейся (*легкой*). Подробное описание расчета и задания КГ изложено в работе [11].

При проведении методических расчетов данной задачи было обнаружено, что если на тяжелой границе задать большее количество столб-

цов расчетной сетки (область 2 на рис. 11), чем на легкой (область 1 на рис. 11), то возникает неустойчивость, изображенная на рис. 12. Данная ситуация смоделирована искусственно, так как на практике не используются существенно несовпадающие сетки (если в области 2 объявить КГ легкой, а в области 1 тяжелой, то подобных *прогибаний* не возникает). Прогибание узлов тяжелой границы в легкую возникает из-за дефектов интерполяции газодинамических величин.

На рис. 13 приведены результаты расчета с квадратичным и линейным сглаживанием скоростей с сохранением полной энергии (алгоритм 2), в котором коэффициент линейного углового сглаживания $c_{\text{лин.у}} = 0,03$, коэффициент линейного контурного сглаживания $c_{\text{лин.к}} = 0,03$, коэффициент квадратичного углового сглаживания $c_{\text{кв.угл}} = 2,0$, коэффициент квадратичного контурного сглаживания $c_{\text{кв.к}} = 0,33$, коэффициент максимального относительного изменения скорости $\alpha_n = 0,015$.

При сравнении рис. 12 и 13 видно, что на рис. 13 нет прогибаний узлов тяжелой границы в легкую, что подтверждает эффективность опи-

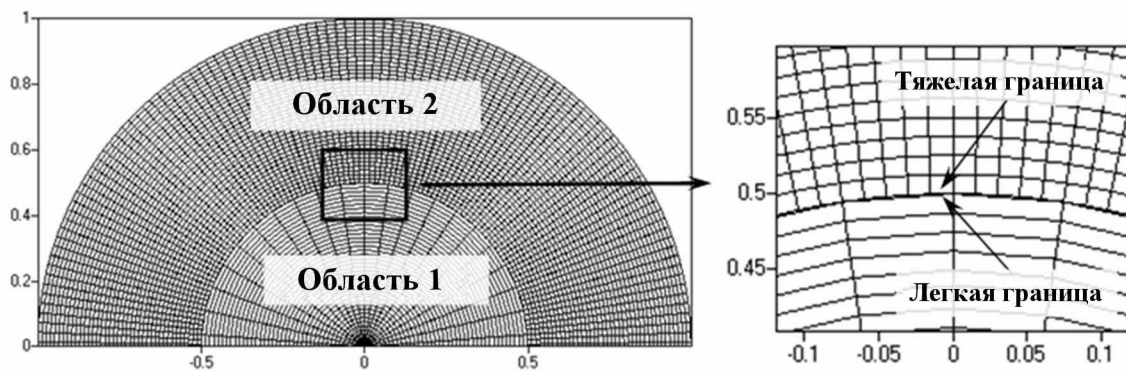


Рис. 11. Тест 1. Начальная геометрия

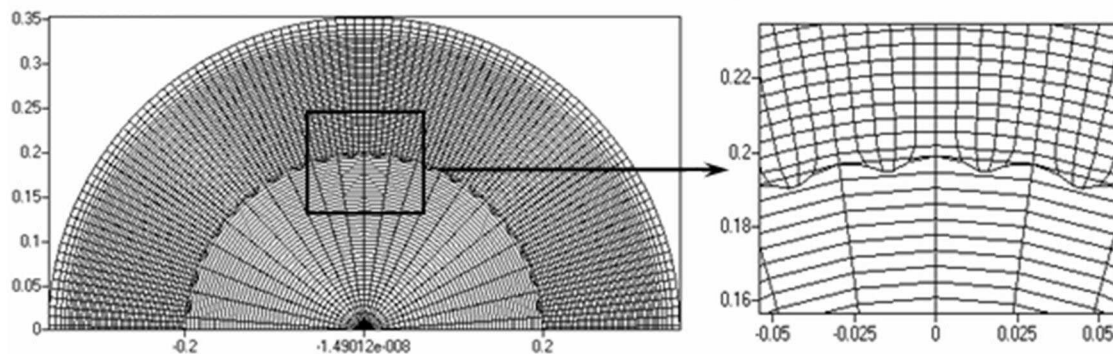


Рис. 12. Тест 1. Сетка в расчете без сглаживания скоростей, $t = 0,78$

санных в данной работе алгоритмов сглаживания.

На рис. 14, 15 приводятся профили плотности и давления в зависимости от радиуса на два контрольных момента времени ($t = 0,5$; $t = 0,78$). Кроме того, там же приведены точные профи-

ли плотности и давления на указанные моменты времени. Из рисунков видно, что сглаживание не приносит дополнительных погрешностей в численное решение.

Результаты, полученные для случаев, когда для сохранения полной энергии используются

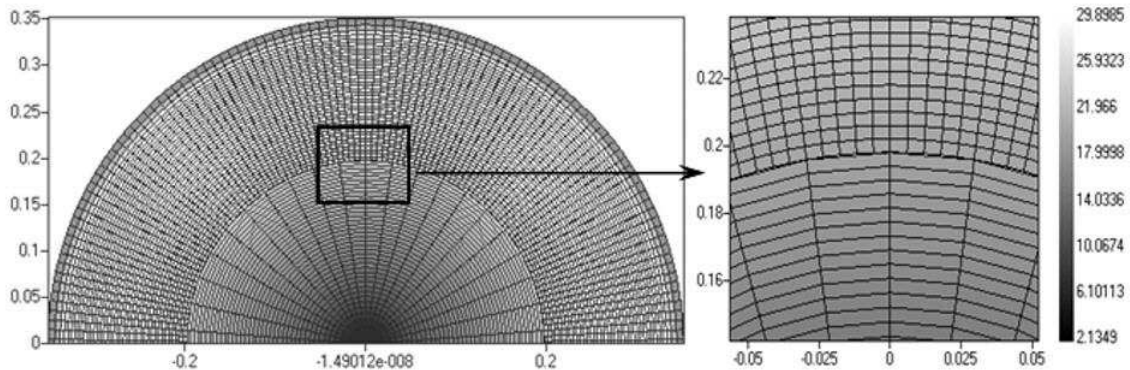


Рис. 13. Тест 1. Сетка в расчете с квадратичным и линейным сглаживанием скоростей с сохранением полной энергии (алгоритм 2), $t = 0,78$

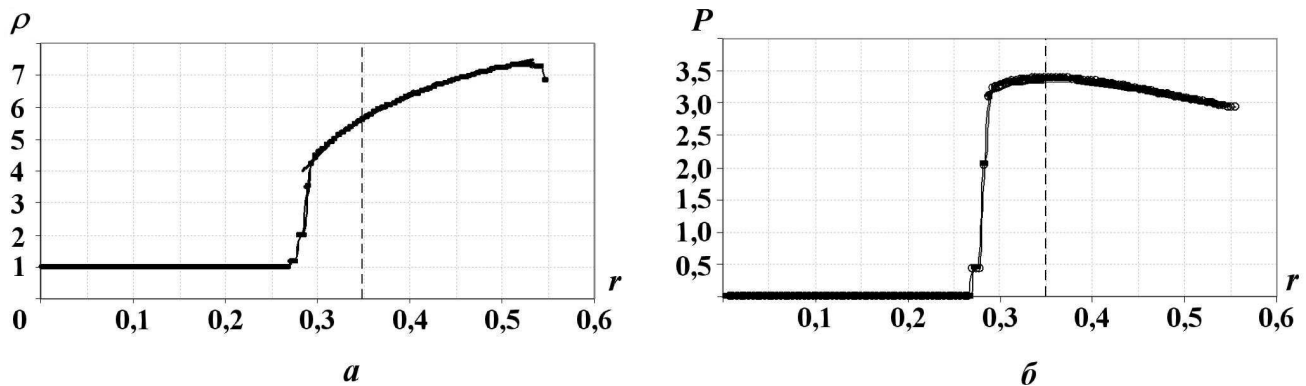


Рис. 14. Тест 1. Профили плотности (a) и давления (b), $t = 0,5$: — — точное решение; —■— расчет без сглаживания; —○— расчет с линейным и квадратичным сглаживанием с сохранением энергии (алгоритм 2); - - - — положение КГ

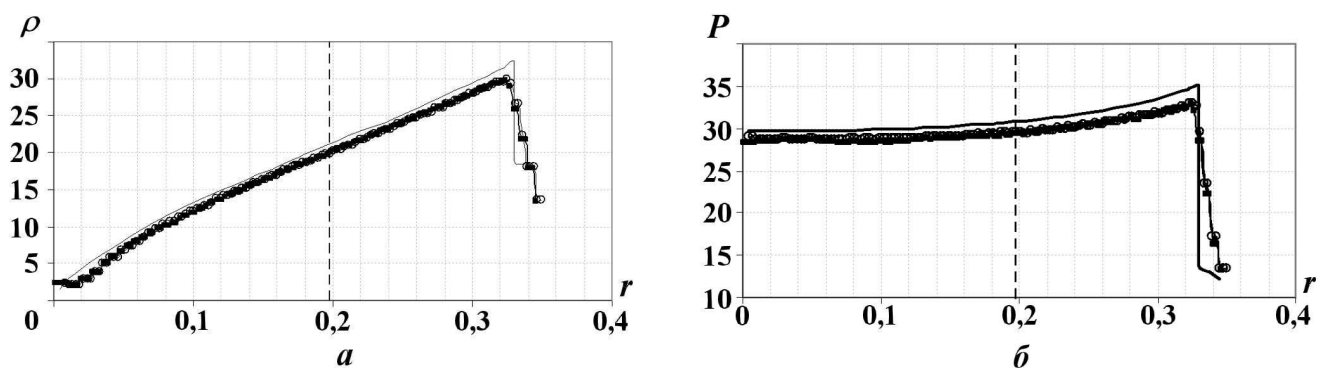


Рис. 15. Тест 1. Профили плотности (a) и давления (b), $t = 0,78$: — — точное решение; —■— расчет без сглаживания; —○— расчет с линейным и квадратичным сглаживанием с сохранением энергии (алгоритм 2); - - - — положение КГ

алгоритмы 1 и 3, не приводятся, поскольку совпадают с результатами, приведенными на рис. 13–15.

В таблице представлен дисбаланс полной энергии на момент времени $t = 0,78$. Дисбаланс рассчитывался по формуле

$$D = \frac{|E_{\text{полн}}| - |A|}{|E_{\text{полн}}|} \cdot 100\%,$$

где $E_{\text{полн}}$ — полная энергия задачи; A — работа на границе счетной области.

Сглаживание с подключением алгоритмов для сохранения полной энергии существенно уменьшает дисбаланс полной энергии по сравнению с расчетами, проведенными без сохранения полной энергии. Также следует отметить, что предложенные алгоритмы сглаживания и алгоритмы для сохранения полной энергии не нарушают плоской, цилиндрической и сферической симметрии одномерных течений.

Тест 2. Stiven Test. Для численного моделирования были использованы данные об экспериментах, проведенных в методике Stiven Test [12]. Расчеты выполнялись в двумерной осесимметричной постановке с учетом упругопластических свойств веществ. Начальная геометрия задачи определялась постановкой экспериментов, она представлена на рис. 16. Более подробная постановка задачи описана в [13].

Во всех расчетах данной задачи задавались следующие начальные условия: скорость снаряда $\dot{U} = 72,2$ м/с.

На рис. 17 показаны поле давлений и фрагмент сетки в расчете без сглаживания скоростей на момент времени $t = 130$ мкс. Видно, что в процессе счета данной задачи возникают возмущения поля скоростей, так называемые песочные часы. К сожалению, искусственная вязкость не эффективна без сглаживания скоростей при подобного рода возмущениях, образуются перелесты счетной сетки. Эту задачу удалось досчитать до $t = 130$ мкс. На рис. 17 представлен

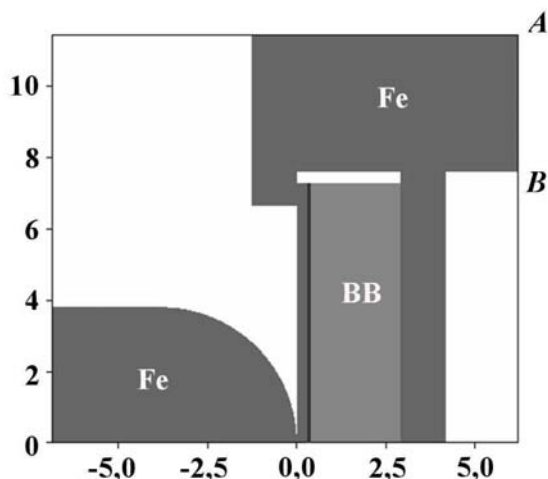


Рис. 16. Тест 2. Начальная геометрия

фрагмент расчетной сетки, где наиболее ярко проявляется эффект песочных часов.

Затем был проведен расчет с использованием только квадратичного сглаживания без сохранения полной энергии: коэффициент квадратичного углового сглаживания $c_{\text{кв.угл}} = 2,0$; коэффициент квадратичного контурного сглаживания $c_{\text{кв.к}} = 0,33$; коэффициент максимального относительного изменения скорости $\alpha_n = 0,015$. На рис. 18 видно, что квадратичное сглаживание малоэффективно при возмущениях типа *песочные часы*, дальнейший счет задачи возможен, но состояние сетки ухудшается.

Рис. 19 демонстрирует результаты расчета с квадратичным и линейным сглаживанием скоростей с сохранением полной энергии (алгоритм 1): коэффициент линейного углового сглаживания $c_{\text{лин.у}} = c_{\text{max}}$; коэффициент линейного контурного сглаживания $c_{\text{лин.к}} = c_{\text{max}}$; $c_{\text{max}} = 0,06 \div 0,09$. В этом расчете коэффициенты линейного сглаживания увеличены ($c_{\text{max}} = 0,06$), обычно берутся уменьшенные коэффициенты $c_{\text{min}} = 0,005 \div 0,03$. Хотя уменьшенные коэффициенты линейного сглаживания вносят минимальную погрешность в численное решение задачи при хорошем качестве сетки, для исправления песоч-

Тест 1. Дисбаланс полной энергии на момент времени $t = 0,78$

Способ расчета	$E_{\text{полн}}$	A	$D, \%$
Без сглаживания	7,8189	-7,8208	-0,0249
Квадратичное сглаживание без сохранения полной энергии	7,8210	-7,8415	-0,2619
Квадратичное и линейное сглаживание с сохранением энергии, алгоритм 1	7,8473	-7,8483	-0,0121
Квадратичное и линейное сглаживание с сохранением энергии, алгоритм 2	7,8468	-7,8481	-0,0169
Квадратичное и линейное сглаживание с сохранением энергии, алгоритм 3	7,8469	-7,8482	-0,0167

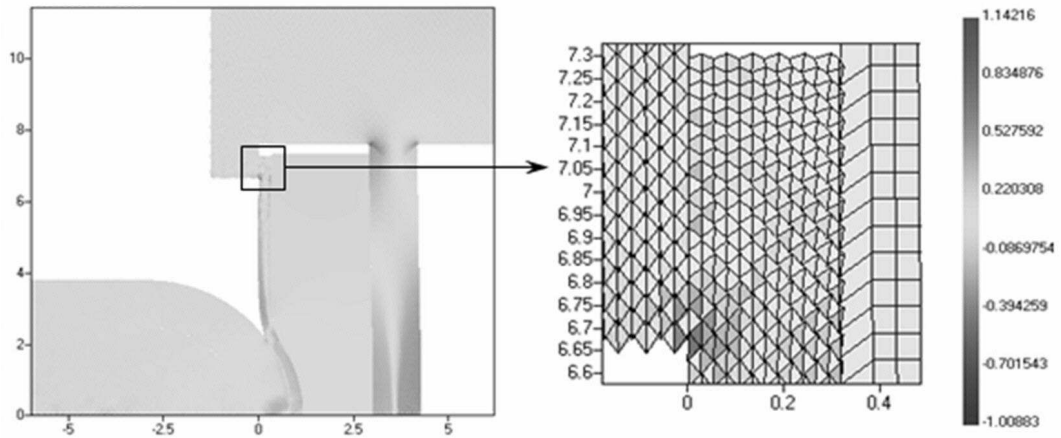


Рис. 17. Тест 2. Поле давлений и фрагмент сетки в расчете без сглаживания скоростей, $t = 130$ мкс

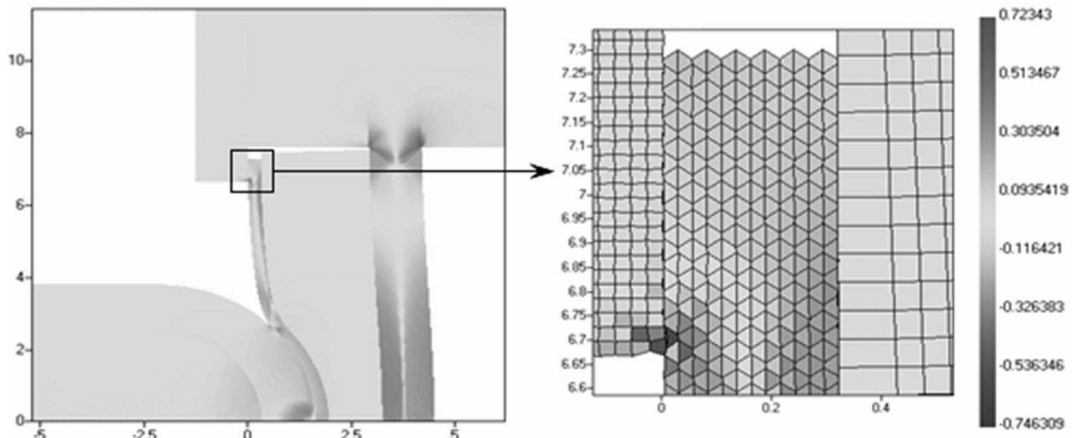


Рис. 18. Тест 2. Поле давлений и фрагмент сетки в расчете с квадратичным сглаживанием скоростей без сохранения полной энергии, $t = 300$ мкс

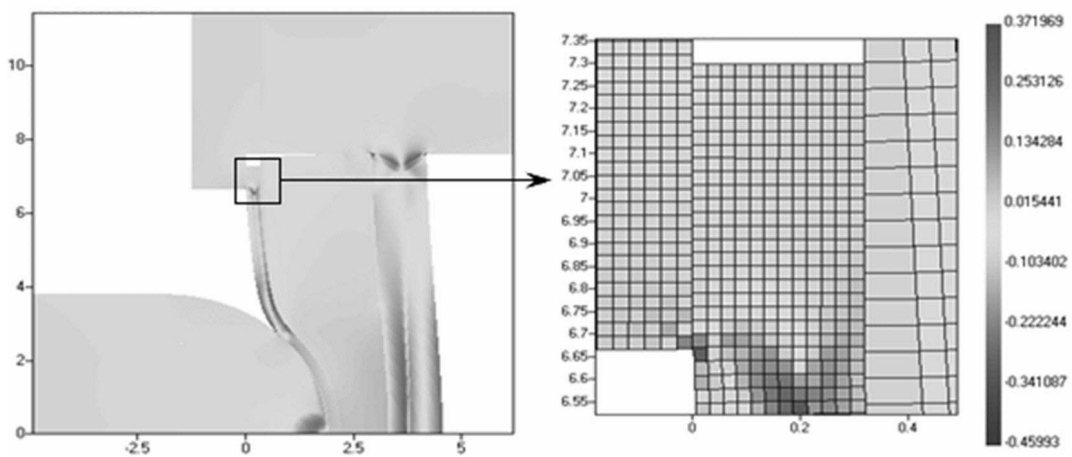


Рис. 19. Тест 2. Поле давлений и фрагмент сетки в расчете с квадратичным и линейным сглаживанием скоростей с сохранением полной энергии (алгоритм 1), $t = 600$ мкс, $c_{\max} = 0,06$

ных часов они также малоэффективны. Из рис. 19 следует, что линейное сглаживание эффективно при возмущениях типа *песочные часы*, ячейки остаются прямоугольными.

Однако подобные возмущения возникают не во всех ячейках счетной области, поэтому был разработан критерий увеличения уменьшенных коэффициентов линейного сглаживания до c_{max} только в ячейках, принимающих форму песочных часов. Результаты применения комбинированного алгоритма продемонстрированы на рис. 20. На неотмеченных участках геометрии коэффициенты сглаживания выбираются линейной интерполяцией между максимальным и ми-

нимальным значениями. Состояние расчетной сетки хорошее, новые алгоритмы сглаживания эффективны при возмущениях типа *песочные часы*.

На рис. 21 приводится график зависимости дисбаланса полной энергии от времени. Дисбаланс полной энергии рассчитывался по следующей формуле:

$$D(t) = \frac{E_0 - E(t)}{E_0} \cdot 100\%,$$

где E_0 — начальная энергия системы; $E(t)$ — энергия системы на момент времени t .

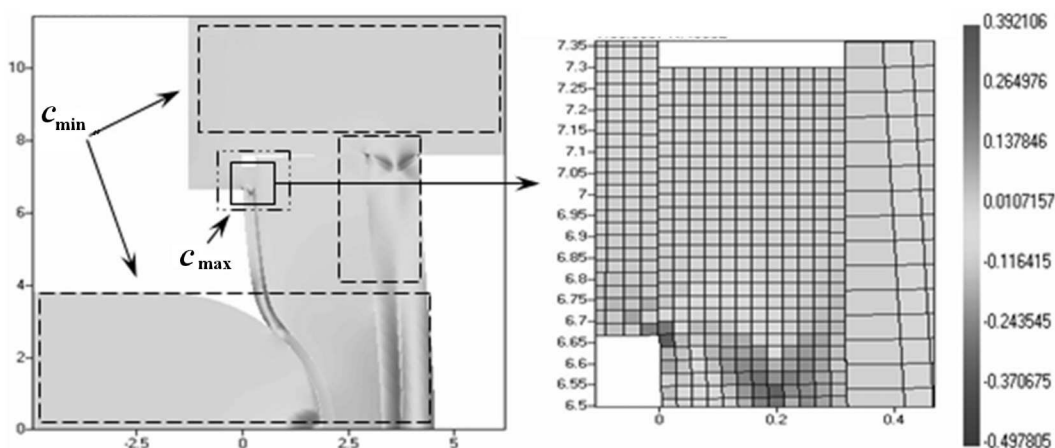


Рис. 20. Тест 2. Поле давлений и фрагмент сетки в расчете с квадратичным и линейным сглаживанием скоростей с сохранением полной энергии (алгоритм 1) совместно с алгоритмом поиска плохих ячеек и критерием увеличения коэффициентов линейного сглаживания, $t = 600$ мкс: - - - области с уменьшенными коэффициентами линейного сглаживания; - · - · - области с увеличенными коэффициентами линейного сглаживания

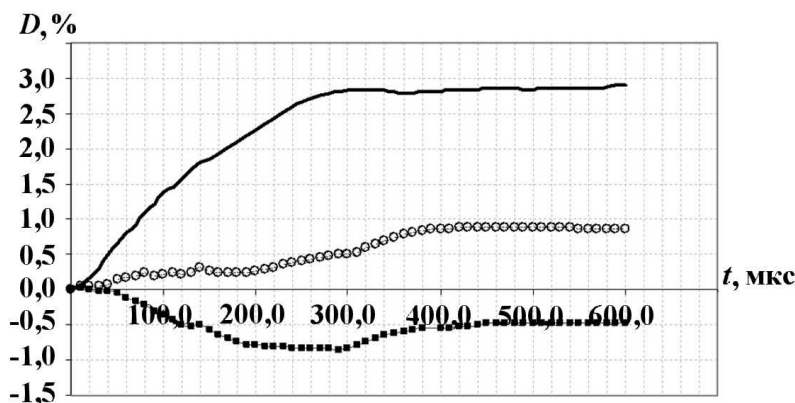


Рис. 21. Тест 2. Зависимость дисбаланса полной энергии от времени: — — расчет с квадратичным сглаживанием скоростей без сохранения полной энергии; —■— расчет с квадратичным и линейным сглаживанием скоростей с сохранением полной энергии (алгоритм 1); —○— расчет с квадратичным и линейным сглаживанием скоростей с сохранением полной энергии (алгоритм 1) совместно с алгоритмом поиска плохих ячеек и критерием увеличения коэффициентов линейного сглаживания

Из рис. 21 видно, что предельное отклонение полной энергии системы от ее первоначального значения в расчете с квадратичным сглаживанием скоростей без сохранения полной энергии составляет около 3%. С подключением к квадратичному сглаживанию линейных алгоритмов в обоих расчетах, с критерием увеличения уменьшенных коэффициентов сглаживания и без него, с сохранением полной энергии (алгоритм 1) дисбаланс не превышает 1%.

Заключение

Результаты расчетов задач показали применимость алгоритмов сглаживания; они эффективны как при пилообразных возмущениях, так и при возмущениях типа *песочные часы*. Описанное сглаживание обладает такими свойствами, как независимость результата его применения от шага интегрирования по времени, сохранение импульса, сохранение полной энергии.

Список литературы

1. Софронов И. Д., Делов В. И., Дмитриева Л. В. и др. Методика Д для расчета многомерных задач механики сплошной среды в переменных Лагранжа на регулярной сетке // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 4. С. 42—50.
2. Баталов М. В., Бахрах С. М., Винокуров О. А. и др. Комплекс "Сигма" для расчета задач двумерной газодинамики // Тр. Всес. семинара по числ. методам механики вязкой жидкости. Новосибирск: Наука, 1969. С. 283—288.
3. Бахрах С. М., Борляев В. В., Володина Н. А. и др. Алгоритмы сглаживания высокочастотных возмущений поля скоростей применительно к расчетам с большим числом точек на многопроцессорной ЭВМ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 1. С. 47—54.
4. Chan R. K. A generalized arbitrary Lagrangian-Eulerian method for incompressible flows with sharp interfaces // J. Comp. Phys. 1975. Vol. 17, No 3. P. 311—312.
5. Дмитриев Н. А., Дмитриева Л. В., Малиновская Е. В., Софронов И. Д. Методика расчета двумерных нестационарных задач газодинамики в переменных Лагранжа: Препринт № 59. М.: ИПМ АН СССР, 1976.
6. Дали Б. Дж. Численное исследование пульсирующих течений в артериях с локальным сгущением. Механика, серия 14. Численное решение задач гидромеханики. М.: Мир, 1977. С. 143—156.
7. Волкова Р. А., Головизнин В. М., Коршунов В. К. Двумерные вариационные схемы газовой динамики с мультиплетным числом степеней свободы: Препринт № 64. М.: ИПМ АН СССР, 1982.
8. Майнчен Дж., Сак С. Метод расчета "Тензор" // Вычислительные методы в газодинамике. М.: Мир, 1976. С. 181—211.
9. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др. Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 1. Требования к тестам. Тесты 1—7 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 3—9.
10. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др. Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 2. Требования к тестам. Тесты 8—15 // Там же. С. 10—14.
11. Чупраков Е. Е., Чернышев Ю. Д., Линник Д. М. Метод расчета трехмерных контактных границ в методике Д // Там же. 2007. Вып. 1. С. 67—73.
12. Idar D. J., Lucht R. A., Scammon V. R. et al. PBX 9501 High Explosive Violent Response / Low Amplitude Insult Project: Phase I. LANL report LA-13164-MS, 1997.
13. Бахрах С. М., Володина Н. А., Гушинов А. Р. Численное моделирование инициирования взрывчатых превращений в твердом взрывчатом веществе при низкоскоростных воздействиях // Химическая физика. 2008. Т. 27, № 8. С. 70—76.

Статья поступила в редакцию 12.01.11.

УДК 532.517.4

О СХОДИМОСТИ РАЗНОСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЗОНЫ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ С УДАРНОЙ ВОЛНОЙ

Д. И. Бобровский, И. В. Большаков, А. Н. Разин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Предлагается новый подход для построения сходящегося разностного решения уравнений турбулентного перемешивания при взаимодействии ударной волны с зоной перемешивания. Алгоритм построения сходящегося решения реализован в рамках модели В. В. Никифорова в методиках ВИХРЬ и АРКТУР, предназначенных для моделирования одномерных течений с учетом турбулентного перемешивания. Приводятся результаты расчетов модельного опыта Погжи (1998 г.) на последовательности сгущающихся сеток, подтверждающие эффективность нового подхода, сформулирована технология проведения расчетов.

Ключевые слова: взаимодействие ударной волны с зоной турбулентного перемешивания, сходимость решения, расчеты опыта Погжи.

Введение

При моделировании течений, в которых турбулентное перемешивание (ТП) развивается на контактных границах (КГ) слоистых систем из неустойчивости Рихтмайера—Мешкова, существует проблема обеспечения сходимости разностного решения уравнений ТП при взаимодействии ударной волны (УВ) с зоной ТП. В расчетах на последовательности измельчающихся сеток ширина зоны ТП и характеристики турбулентности зависят от градиентов средних газодинамических величин на фронте УВ. Поскольку градиенты на фронте УВ обратно пропорциональны размеру счетной ячейки, результаты моделирования на последовательности сгущающихся сеток могут отличаться значительно. Ясно, что в таких условиях сложно интерпретировать результаты моделирования, а совершенствование математической модели становится затруднительным.

Вопросы моделирования взаимодействия УВ с зоной ТП с использованием модели В. В. Никифорова [1] рассматривались в [2, 3], однако удовлетворительного решения проблемы не было найдено. В настоящей работе рассматривается новый подход для построения сходящегося

разностного решения уравнений ТП и приводятся результаты расчетов опыта Погжи [4], подтверждающие эффективность нового подхода. Ключевым моментом данного подхода является поиск центра *конечно-разностной* УВ (в расчетах многослойных систем возможна ситуация с определением одновременно нескольких УВ), а единственным параметром является ширина фронта конечно-разностной УВ. При задании ширины фронта конечно-разностной УВ авторы использовали результаты [5], где вопрос о ширине фронта УВ изучался экспериментально.

Построение сходящегося решения

Построение сходящегося разностного решения при взаимодействии УВ с зоной ТП рассмотрим на примере моделирования опыта Погжи. В опыте ударная труба с поперечным сечением 8×8 см заполнялась двумя газами (SF_6 и воздух), первоначально разделенными пластиковой мембраной толщиной 0,3 мкм (рис. 1). Левый торец трубы, к которому примыкает воздух, закрыт жесткой стенкой. Начальное расстояние между КГ (мембраной) и жесткой стенкой ($r = 0$) составляет 30 см. На другом конце трубы

($r = 120$ см) формируется УВ с числом Маха $M = 1,45$, движущаяся по SF_6 . В опыте развитие зоны ТП происходит в результате ее взаимодействия с серией УВ, отраженных от левого торца ударной трубы. Схема постановки расчета приведена на рис. 1 (подробности постановки расчета и метод инициализации ТП см. в [6]), данные к расчету представлены в таблице.

Прежде всего продемонстрируем зависимость ширины зоны ТП и градиентов давления на фронте УВ, проходящей через зону ТП, от размера счетной ячейки в стандартных расчетах, выполненных по методике ВИХРЬ [7] с использованием модели Никифорова. Моделирование ТП начинается в момент времени $t \approx 47 \times 10^{-4}$ с, когда после взаимодействия УВ с КГ этап развития неустойчивости закончен и с использованием теоретической модели, предназначенной для расчета роста амплитуды пузырей и струй, определена ширина начальной зоны ТП [6]. В начальной зоне ТП задавались относительная интенсивность квадрата пульсаций плотности $R = 0,45$, кинетические энергии продольной и поперечной компонент скорости $e_1 = e_2 = 0,85 \text{ см}^2/\text{мс}^2$ (интенсивность турбулентности $I = 10\%$), скорость диссипации $Q = 20 \text{ см}^2/\text{мс}^3$.

Эволюция расчетных и экспериментальных положений границ зоны ТП показана на рис. 2. Профили градиентов давления на фронте УВ при $t \approx 57,5$ (в момент прохождения УВ через зону ТП) приведены на рис. 3. Результаты, представленные на рис. 2 и 3, получены на сетках 1N–8N (сетка 1N содержит 300 точек в области с воздухом и 900 точек в области с SF_6). Для сохранения начальной ширины зоны ТП при каждом измельчении сетки в два раза число точек, в которых задавались начальные значения турбу-



Рис. 1. Схема постановки расчета

лентных величин, увеличивалось в два раза (подробности см. в [8]).

Из рис. 2 следует отсутствие зависимости решения от размера счетной ячейки (h) до момента времени $t \approx 57$, т. е. момента взаимодействия отраженной от левого торца трубы УВ с зоной ТП. На отрезке времени $57 < t < 58$ отраженная от левого торца УВ проходит через зону ТП. Согласно рис. 3 ширина фронта конечно-разностной УВ зависит от h и составляет $\Delta \approx 0,4$

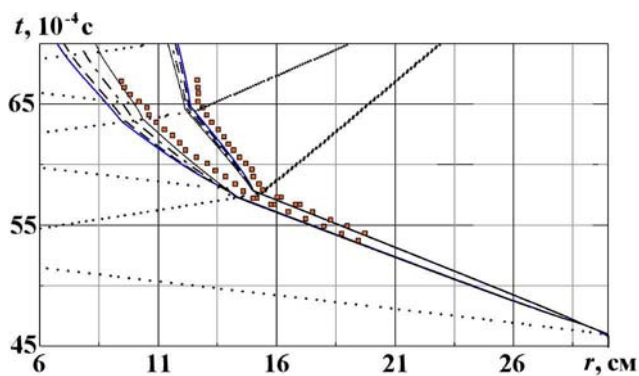


Рис. 2. Границы зон ТП и УВ в расчетах на сходимости: — — сетка 1N; - - - сетка 2N; - - - сетка 4N; — — сетка 8N; ■ — зона ТП в эксперименте; ... — УВ

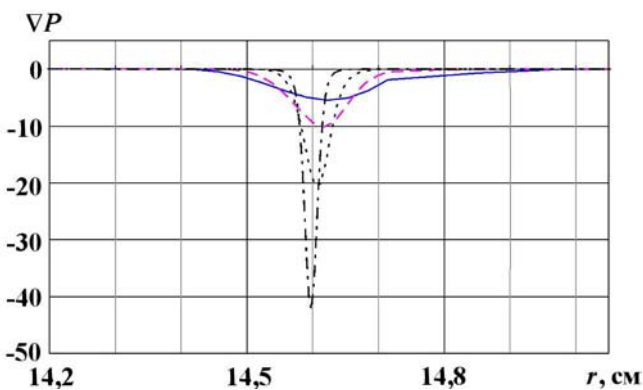


Рис. 3. Профили градиентов давления на фронте УВ, $t \approx 57,5$: — — сетка 1N; - - - сетка 2N; - - - сетка 4N; - - - сетка 8N

Параметры начального состояния системы

Вещество	r , см	ρ_0 , г/см ³	E_0 , см ² /мс ²	γ	C_V , 10 ² Дж/(кг·К)
Воздух	0–30	0,0012	2 083,33	1,400	7,079
SF_6 (эле-газ)	30–120	0,0060	1 773,05	1,094	6,059

на сетке $1N$, $\Delta \approx 0,2$ на сетке $2N$, $\Delta \approx 0,1$ на сетке $4N$, $\Delta \approx 0,05$ на сетке $8N$. Так как ширина фронта конечно-разностной УВ прямо пропорциональна, а градиенты средних газодинамических величин на фронте обратно пропорциональны размеру счетной ячейки h , разностное решение уравнений ТП при $t > 58$ становится зависимым от сетки, вследствие чего при $t > 58$ сходимость решения отсутствует. Масштаб зависимости ширины зоны ТП от размера счетной ячейки можно оценить по данным рис. 2: при $t = 70$ на сетке $1N$ расчетная ширина зоны ТП составляет $L \approx 5,05$ см, на сетке $8N$ $L \approx 3,03$ см.

Чтобы исключить зависимость градиентов средних газодинамических величин на фронте УВ от размера счетной ячейки, предлагается следующий подход в построении сходящегося решения уравнений ТП.

Примем, что используемая для решения уравнений газовой динамики разностная схема размывает фронт конечно-разностной УВ на четыре ячейки, т. е. ширина фронта конечно-разностной УВ $\Delta = 4h$ (h — линейный размер ячейки на фронте УВ). При сделанном предположении градиент давления на фронте конечно-разностной УВ можно аппроксимировать выражением

$$\nabla P = \frac{P_2 - P_1}{4h} = \frac{P_2 - P_1}{\Delta}, \quad (1)$$

где P_1, P_2 — давление перед и за фронтом УВ соответственно. Способ вычисления градиента по (1) довольно сложно реализовать в программных комплексах при моделировании многослойных систем, так как интенсивность конечно-разностной УВ меняется при движении в сложной системе. Проще реализуется расчет градиента давления на фронте конечно-разностной УВ в ячейке k по соотношению

$$\nabla P = \frac{2(P_{k+1} - P_{k-1}))}{\Delta}, \quad (2)$$

где k — номер ячейки разностной сетки.

Вычисление градиента давления через ширину фронта УВ (Δ), а не через размер ячейки (h) используем только на фронте УВ, т. е. в ячейках, где выполняется условие $\frac{\partial U}{\partial r} < 0$. Вне фронта УВ градиент давления определяем обычным образом, т. е. через линейный размер ячейки h .

При таком алгоритме вычисления градиентов на фронте УВ по задаваемой ширине фронта Δ и

размеру ячейки h точно находятся ячейки, принадлежащие фронту УВ, если известно положение центра волны. Скорректированные градиенты средних газодинамических величин используем только при вычислении генерационных членов в уравнениях ТП и не используем при интегрировании уравнений газовой динамики.

На рис. 4 (см. также цветную вкладку) представлены профили градиентов давления, рассчитанные на сетках $1N-16N$ по формулам (2). Как следует из представленных результатов, на последовательности сгущающихся сеток максимумы градиентов давления на фронте УВ близки, однако ширина фронта конечно-разностной УВ остается зависимой от размера счетной ячейки.

На рис. 5 и 6 (см. также цветную вкладку) приведены границы зон ТП и пульсации продольной компоненты скорости в расчетах на последовательности сгущающихся сеток для профилей градиентов давления, соответствующих рис. 4. Согласно данным рис. 5 и 6 ширина зоны ТП не зависит от h , но имеется зависимость от h пульсаций продольной компоненты скорости.

Для обеспечения независимости решения от h и по пульсациям скорости необходимо убрать зависимость ширины фронта конечно-разностной УВ от h . С этой целью рассчитанные по (2) профили градиентов давления (и других газодинамических величин) пересчитаем на заданную ширину фронта УВ (на ширину Δ). По профилю (2) находим ячейку, в которой достигается $\max(\nabla P)$. Эту ячейку принимаем за центр УВ. Затем заменяем профиль градиентов давления (2) на профиль треугольного импульса с

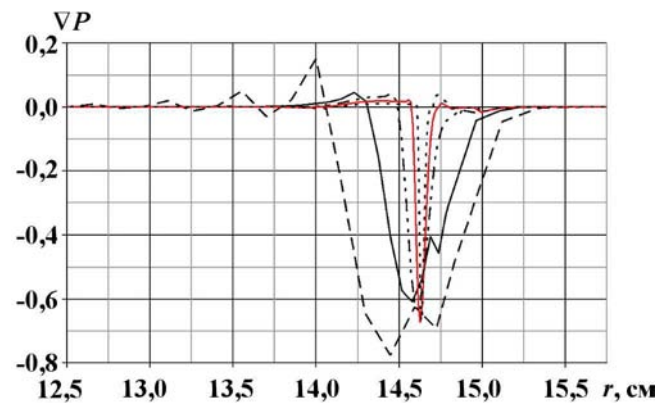


Рис. 4. Профили градиентов давления, $t \approx 57,5$:
 - - - сетка $1N$; — — — сетка $2N$; - - - - сетка $4N$;
 — · — · — сетка $8N$; - - - - сетка $16N$

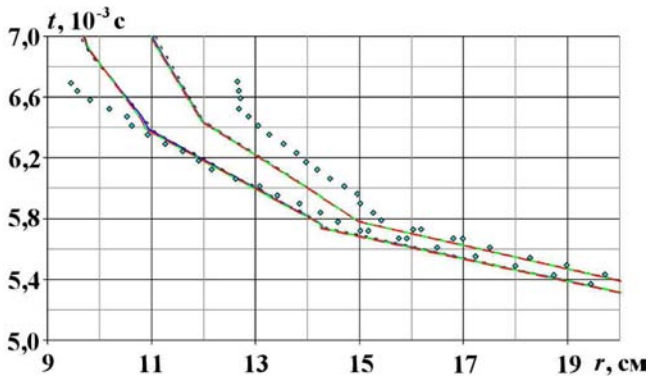


Рис. 5. Границы зон ТП, $\Delta = 1,2$: --- сетка 1N; — сетка 2N; —·— сетка 4N; ··· сетка 8N; \diamond — эксперимент

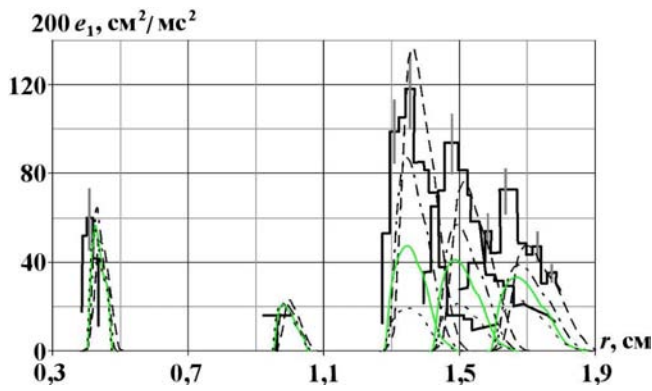


Рис. 6. Пульсации продольной компоненты скорости, $\Delta = 1,2$: --- сетка 1N; ---·--- сетка 2N; —·— сетка 4N; ··· сетка 8N; — эксперимент

вершиной в центре УВ. В вершине импульса градиент давления не меняем.

Пример расчета градиента давления на фронте УВ для $\Delta = 1,2$ представлен на рис. 7 (см. также цветную вкладку). Из представленных результатов следует, что максимальные значения градиентов давления отличаются друг от друга не более чем на 10%. Диапазон изменения градиентов в 10% можно уменьшить, определив P_2 и P_1 в формуле (1), например, в результате предварительного проведенного расчета. Пульсации продольной скорости в расчетах на сходимость для профилей градиентов, соответствующих рис. 7, показаны на рис. 8 (см. также цветную вкладку).

На рис. 9 приведены результаты расчетов ширины зоны ТП при различных значениях параметра Δ , которые демонстрируют, что в рассмотренном диапазоне изменения Δ ширина зоны перемешивания не изменяется.

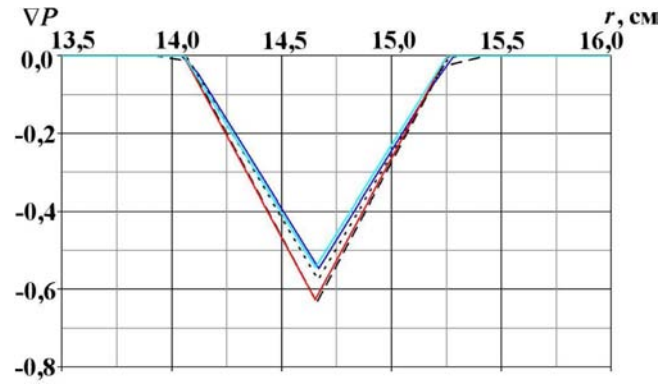


Рис. 7. Профили градиентов давления, $t \approx 57,5$; $\Delta = 1,2$: --- сетка 1N; — сетка 2N; ---·--- сетка 4N; —·— сетка 8N; — сетка 16N

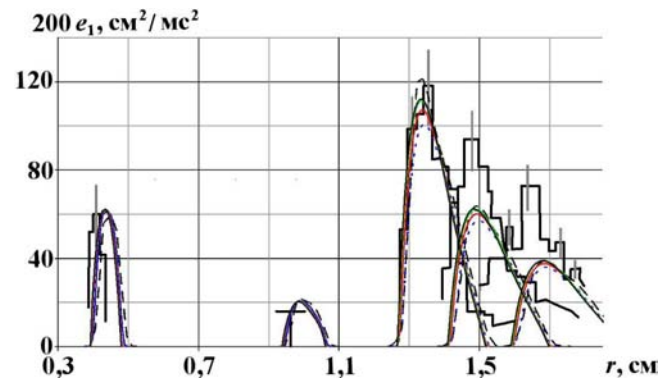


Рис. 8. Пульсации продольной скорости в расчетах на сходимость, $\Delta = 1,2$; $R = 0,45$; $e_1 = e_2 = 0,85$ ($I = 10\%$); $Q = 10$: --- сетка 1N; ---·--- сетка 2N; —·— сетка 4N; —·— сетка 8N; — сетка 16N; — эксперимент

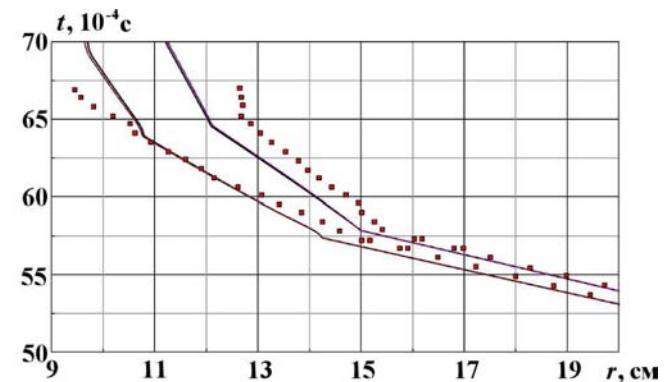


Рис. 9. Границы зон ТП для различных значений Δ , сетка 4N: — $\Delta = 0,2$; —·— $\Delta = 0,8$; ··· $\Delta = 1,2$; \blacksquare — зона ТП в эксперименте

Вопрос о ширине фронта УВ, проходящей через зону ТП, изучался экспериментально в [5]. В первой серии экспериментов ширина фронта УВ исследовалась для пары газов Аг—Не (число Атвуда $A=0,82$, $M=1,7$), во второй серии — для газов N_2 —Не (число Атвуда $A=0,75$, $M=2,0$). Согласно [5] в первой серии опытов ширина фронта УВ после прохождения зоны ТП, формирующейся на границе газов, изменялась в пределах $\Delta \approx 14$ — 16 мм, во второй серии опытов — в пределах $\Delta \approx 11$ — 13 мм. Как отмечается в [5], в экспериментах наблюдалась зависимость ширины фронта УВ от числа Атвуда: при увеличении числа A ширина фронта УВ увеличивалась. Таким образом, полученные в экспериментах оценки ширины фронта реальной УВ можно использовать в расчетах на сходимость.

О сходимости решения при взаимодействии УВ с зоной ТП

В практических задачах турбулентному перемешиванию предшествует этап развития неустойчивости. Для решения уравнений ТП необходимо задать начальные данные (начальную ширину зоны и характеристики турбулентности в ней), которые определяются в процессе моделирования этапа развития неустойчивости. В общем случае эта задача не имеет точного решения, в связи с чем при моделировании этапа развития неустойчивости, задании начальных условий для решения уравнений ТП (инициализации ТП) и обосновании результатов расчета возникают затруднения.

В работе [6] при разработке метода инициализации ТП использовалось предположение, что на момент перехода от этапа развития неустойчивости к ТП ширина возмущенной зоны в большей степени зависит от начальных значений амплитуды (a_0), длины волны возмущения (k_0) КГ, перепада плотностей на КГ и скорости УВ. В то же время такие характеристики турбулентности, как квадрат пульсаций плотности (R), компоненты кинетической энергии турбулентности в продольном и поперечном направлениях (e_1 , e_2), формирующиеся в возмущенной зоне на момент перехода от этапа развития неустойчивости к ТП, и скорость диссипации (Q), в большей степени зависят от свойств контактирующих газов и параметров УВ, падающей на КГ, и в меньшей степени — от a_0 , k_0 . В методе инициализации [6] нет зависимости характеристик турбулентности

от неизвестных значений a_0 и k_0 , а от начальной шероховатости КГ зависит лишь начальная ширина возмущенной зоны (L). Перспективность данного подхода для инициализации ТП следует из того, что современная диагностическая аппаратура позволяет измерять кинетическую энергию турбулентности (а по значениям кинетической энергии, замеренной в нескольких точках, и скорость диссипации) при проведении экспериментов.

Для оценки влияния начальных значений скорости диссипации на развитие ширины зоны ТП и эволюцию кинетической энергии турбулентности по методике ВИХРЬ проведено три расчета опыта Погжи на равномерной разностной сетке, содержащей 300 точек в области с воздухом и 900 точек в области SF_6 . В этих расчетах начальная интенсивность турбулентности $I = 10\%$, а скорость диссипации варьировалась: $Q = 3$; $Q = 8$; $Q = 20$.

УВ выходит на КГ при $t \approx 46$. После распада разрыва на КГ в воздух пойдет УВ, а в SF_6 — волна разрежения. В результате взаимодействия УВ с КГ *воздух*— SF_6 скорость КГ и число Атвуда принимают значения $U_{КГ} \approx 13$; $A \approx 0,69$.

Оценим по экспериментальным данным корректность задания начальной интенсивности турбулентности и скорости диссипации в выполненных расчетах. Согласно экспериментальным данным (см. рис. 6 и цветную вкладку) на самом близком от КГ датчике ($X = 24,9$ см) интенсивность турбулентности в расчетных единицах составляет $\approx 6\%$. Экспериментальное значение интенсивности турбулентности на датчике $X = 17,45$ см в расчетных единицах составляет $\approx 3,3\%$. В предположении линейности затухания кинетической энергии турбулентности начальная интенсивность турбулентности на КГ после прохождения УВ составит $\approx 7,5\%$. В эксперименте затухание продольной кинетической энергии турбулентности после прохождения УВ через КГ выше, чем при линейном законе, поскольку описывается формулой $e_1 \approx 540 \Delta R^{-1,35} = 540 (Ut)^{-1,35}$ (ΔR — расстояние от первоначального положения КГ в см). Следовательно, выбранная начальная интенсивность турбулентности в расчетах согласуется с экспериментальной.

Результаты моделирования приведены на рис. 10, 11, из которых следует: чем сильнее затухание турбулентности на отрезке времени $46 < t < 57$, тем меньше рост зоны ТП после взаимодействия с отраженной УВ и тем меньше

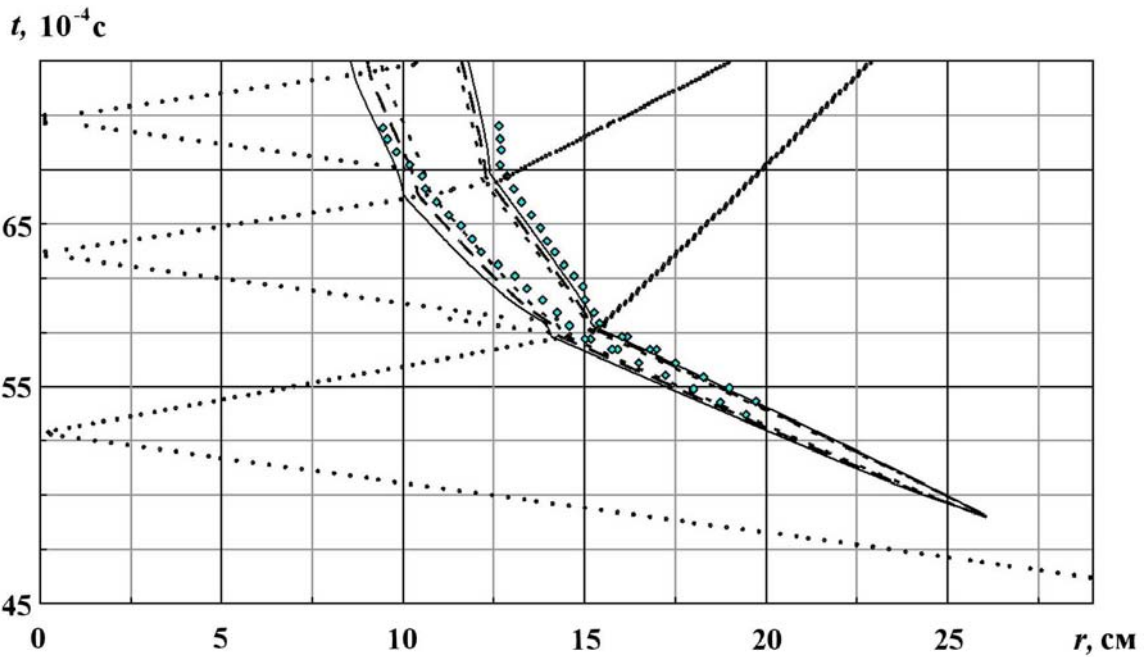


Рис. 10. (r, t) -диаграмма границ зоны ТП при различных значениях Q : - - - - $Q = 20$; - · - · - $Q = 8$; — — — $Q = 3$; \diamond — зона ТП в эксперименте; \cdots — УВ (методика ВИХРЬ)

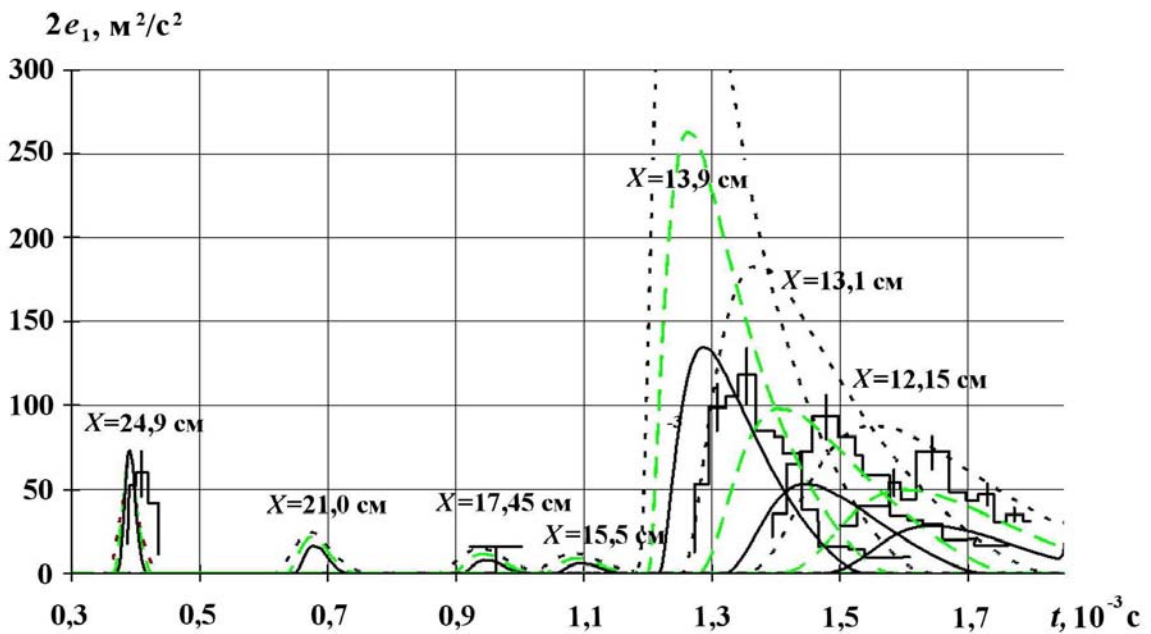


Рис. 11. Зависимость продольной кинетической энергии турбулентности от начального значения Q : - - - - $Q = 3$; - · - · - $Q = 8$; — — — $Q = 20$; — — — эксперимент

кинетическая энергия на датчиках $X = 13,9$ см; $X = 13,1$ см; $X = 12,15$ см. Отметим, что результат моделирования данной серии расчетов будет другим при измельчении разностной сетки ввиду зависимости от h градиентов средних газодинамических величин на фронте УВ. Таким обра-

зом, вопрос сходимости решения уравнений ТП при измельчении сетки имеет ключевое значение при обосновании результатов.

Рассмотрим результаты моделирования по методике АРКТУР [9] опыта Погжи с использованием нового подхода для обеспечения сходимости

сти решения. В расчетах на сходимость использовались сетки 1N, 2N, 4N, 8N, 16N (сетка 1N содержит 100 точек в воздухе и 300 точек в SF₆). В процессе счета в пяти эйлеровых датчиках накапливались значения среднего квадрата продольных пульсаций скорости $\overline{u'u'} = 200e_1$ в зависимости от времени $t - t_{SW}$, прошедшего после выхода первой УВ на границу газов ($t_{SW} \approx 4,6 \times 10^{-3}$ с). В расчетах начальная интенсивность турбулентности $I = 10\%$, что соответствует заданию $e_1 = e_2 = 0,85 \text{ см}^2/\text{мс}^2$, начальная скорость диссипации $Q = 10$, а начальное значение квадрата пульсаций плотности принималось равным $R = 0,45$.

Результаты расчетов на сходимость с использованием нового подхода для вычисления градиентов газодинамических величин на фронте УВ приведены на рис. 8, 12 (см. также цветную вкладку). Коррекция градиентов средних газодинамических величин на фронте УВ выполнялась по (2) лишь на первой УВ ($5,7 < t < 5,8$) с $\Delta = 1,2$. Отметим, что в расчетах имеется сходимость как по ширине зоны ТП, так и по пульсациям скорости.

Согласно данным рис. 12 на момент $t = 70$ расчетная и экспериментальная ширина зоны ТП значительно отличаются друг от друга. В расчетах опыта Погжи, проведенных ранее с другим методом инициализации (см., например, [10]), ширина зоны ТП ($L \approx 2,3$) несколько больше, чем приведенная на рис. 12, а пульсации скорости на датчиках заметно выше, чем в эксперименте (например, в [10] на датчике $X = 13,9 \text{ см}$ $2e_1 = 350 \text{ м}^2/\text{с}^2$). Разная ширина зоны ТП является следствием того, что в расчетах [10] интен-

сивность турбулентности после прохождения УВ через КГ задавалась выше, чем в расчетах, представленных на рис. 12. Из других особенностей расчета [10] отметим использование процедуры сглаживания градиентов средних газодинамических величин.

Результаты моделирования опыта [4], выполненные на равномерной разностной сетке (150 ячеек в воздухе и 600 ячеек в SF₆) по модели Никифорова, приведены также в [11]. В [11] наблюдается удовлетворительное согласие расчетных данных с экспериментом по ширине зоны ТП, однако расчетное усиление пульсаций скорости после взаимодействия отраженной от левого торца УВ с зоной ТП (на датчике $X = 13,9 \text{ см}$ $2e_1 = 220 \text{ м}^2/\text{с}^2$) больше, чем в эксперименте. Таким образом, в численных расчетах описать опытные данные [4] (одновременно ширину зоны ТП и поведение пульсаций продольной компоненты скорости) с хорошей точностью по модели Никифорова не удалось.

При оценке результатов численных расчетов необходимо принять во внимание две особенности постановки и проведения опыта. Перед проведением опытов [4] газы разделяются тонкой пленкой. Пленка разрывается УВ, падающей на КГ, в результате чего формируется начальная зона перемешивания. При этом механические свойства пленки могут оказывать существенное влияние на весь дальнейший процесс эволюции зоны ТП. Влияние свойств пленки на ширину зоны ТП подробно исследовалось Е. Е. Мешковым совместно с французскими экспериментаторами (результаты не опубликованы). Опыты показали, что в зависимости от свойств пленки в одних и тех же опытах конечная ширина зоны ТП может отличаться до двух раз. Кроме того, при движении рассеивающих лазерное излучение примесных частиц (скорость которых измеряется в методе доплеровской анемометрии) в быстропеременном потоке газа их скорость может отклоняться от локального значения скорости газа. Поскольку в [4] эти вопросы не изучались, данные [4], по-видимому, следует воспринимать как ориентировочные, пока не будут проведены аналогичные опыты другими экспериментаторами. Тем не менее с точки зрения тестирования методик расчета ТП данный опыт выгодно отличается от опытов, в которых извлекается лишь информация об эволюции ширины зоны ТП. Информация, полученная в эксперименте [4], позволяет протестировать как качество моделирования ширины зоны ТП, так и

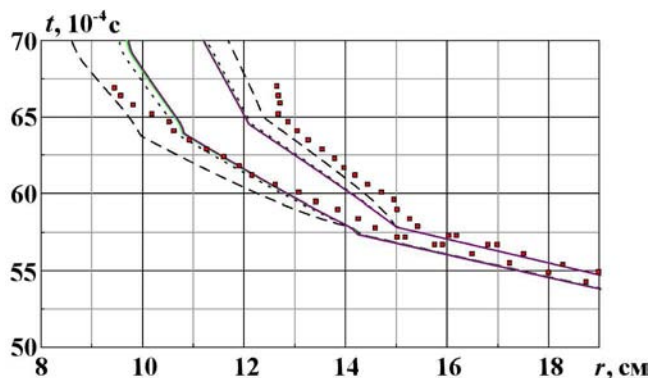


Рис. 12. Границы зоны ТП в расчетах на сходимость, $\Delta = 1,2$; $R = 0,45$; $e_1 = e_2 = 0,85$ ($I = 10\%$); $Q = 10$: — — — сетка 1N; - - - - сетка 2N; — · — сетка 4N; — — — сетка 8N; ■ — зона ТП в эксперименте

энергетику турбулентности. Измеренные в опыте пульсации скорости позволяют с удовлетворительной точностью выполнить инициализацию ТП в расчете. Кроме того, опытные данные дают информацию о затухании турбулентности как после прохождения через КГ первой УВ, так и после взаимодействия отраженной от левого торца трубы УВ с зоной ТП. В то же время при моделировании опытов, где извлекается лишь информация об эволюции ширины зоны ТП, результаты численного расчета можно приблизить к экспериментальной информации путем варьирования начальной шероховатости КГ (неопределенных параметров) и выбора счетной сетки.

Используя полученную выше информацию и учитывая неопределенность в начальной шероховатости КГ в практических задачах, авторы предлагают следующую технологию проведения исследований по развитию неустойчивости и ТП на КГ слоистых систем.

Задаем начальные значения амплитуды и длины начального возмущения КГ: a_0 , k_0 . Рассчитываем эволюцию начального возмущения по теоретической модели, как это описано в [6]. Неопределенность в задании a_0 , k_0 учтем путем варьирования начальных значений кинетической энергии турбулентности и скорости диссипации на этапе перехода от развития неустойчивости к ТП, т. е. при задании начальных значений $e_1 = e_2$ и Q . С этой целью выполним две серии расчетов.

Согласно опытам Погжи в первой серии расчетов (всего три расчета) можно принять $I \approx 10\%$; при этом $Q \sim 5e_1$ в первом расчете, $Q \sim 10e_1$ во втором расчете, $Q \sim 20e_1$ в третьем расчете. Меньшему значению скорости диссипации будет соответствовать большее перемешивание слоев после взаимодействия УВ, отраженной от левой границы, с зоной ТП. Затем проводится вторая серия численных экспериментов (также три расчета) с увеличенной начальной интенсивностью турбулентности: $I \approx 20\%$. Расчеты второй серии будем трактовать как моделирование, при котором шероховатость фронта УВ, падающей на КГ, в практических задачах дополнительно усиливает интенсивность турбулентности после взаимодействия УВ с КГ.

При проведении одномерных расчетов на современных вычислительных системах данный подход вполне возможен. Анализ полученных результатов покажет пределы устойчивого поведения КГ при взаимодействии с УВ. Предложен-

ный подход может уточняться по мере появления новой информации по росту зоны ТП и эволюции кинетической энергии турбулентности при взаимодействии зоны ТП с УВ (необходимо провести опыты, подобные опыту Погжи, для других пар рабочих газов). Для уточнения ширины фронта УВ при прохождении ею зоны ТП следует провести опыты, аналогичные [5].

Заключение

Построено сходящееся разностное решение уравнений ТП модели Никифорова при развитии зоны перемешивания на КГ разноплотных газов под действием УВ. Эффективность нового подхода продемонстрирована на примере моделирования опыта Погжи. При моделировании ТП в многослойных системах ключевым моментом нового подхода является поиск центра конечно-разностных УВ, находящихся в зонах ТП.

Предложена технология численного исследования возможного поведения КГ при развитии неустойчивости Рихтмайера—Мешкова.

Список литературы

1. Андронов В. А., Бахрах С. М., Мешков Е. Е. и др. Экспериментальное исследование и численное моделирование турбулентного перемешивания в одномерных течениях // Докл. АН СССР. 1982. Т. 264, № 1. С. 76—82.
2. Никифоров В. В. Расчет гравитационного турбулентного перемешивания в неавтономных течениях // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1993. Вып. 1. С. 3—13.
3. Козлов В. И. Моделирование взаимодействия ударных волн и турбулентности // 8-е Харитоновские тематические чтения. Саратов: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006. С. 258—265.
4. Poggi F., Thorembey M.-H., Rodriguez G. Velocity measurements in turbulent gaseous mixtures induced by Richtmyer-Meshkov instability // Physics of Fluids. 1998. Vol. 10, No 11. P. 2698—2700.
5. Shestachenko O. E., Kucherenko Yu. A., Piskunov Yu. A. et al. Investigation of dispersion of stationary shock wave upon tur-

- bulent layer passage // IWPCTM7. St.-Petersburg, Russia, 1999. P. 118—123.
6. *Разин А. Н.* О начальной интенсивности турбулентности и росте зоны турбулентного перемешивания при неустойчивости Рихтмайера—Мешкова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 1. С. 29—43.
 7. *Андронов В. А., Козлов В. И., Никифоров В. В. и др.* Методика расчета турбулентного перемешивания в одномерных течениях (методика ВИХРЬ) // Там же. 1994. Вып. 2. С. 59—64.
 8. *Разин А. Н., Козлов В. И., Сапожников И. В.* О сходимости разностного решения уравнений турбулентного перемешивания для безударных течений // Там же. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2000. Вып. 2—3. С. 3—12.
 9. *Разин А. Н., Долголёва Г. В., Мжачих С. В. и др.* Развитие методик и программ расчета турбулентных течений с использованием модели В. В. Никифорова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 1. С. 121—133.
 10. *Козлов В. И., Сапожников И. В.* Моделирование нестационарных турбулентных течений на основе модифицированной модели Никифорова // 8-е Харитоновские тематические чтения. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006. С. 266—272.
 11. *Козлов В. И., Разин А. Н.* Поведение средних квадратов пульсаций скорости при взаимодействии зоны турбулентного перемешивания с ударными волнами // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2001. Вып. 3. С. 3—8.

Статья поступила в редакцию 18.07.11.

УДК 539.4

РЕЛАКСАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ СДВИГОВОЙ ПРОЧНОСТИ ПЯТИ МЕТАЛЛОВ (АЛЮМИНИЙ, БЕРИЛЛИЙ, МЕДЬ, ТАНТАЛ, УРАН)

Б. Л. Глушак, О. Н. Игнатова, С. С. Надёжин, В. А. Раевский
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Представлены определяющие соотношения пяти металлов — алюминиевого сплава АМгб, бериллия, меди М1, тантала марки ТВЧ, природного урана. Для расчетов девиаторной составляющей сдвигового напряжения используется феноменологическая упругопластическая релаксационная модель. Шаровая составляющая тензора напряжений выражается уравнением состояния в форме Ми–Грюнайзена. Зависимость температуры плавления от плотности определяется на основе уравнения Линдемана. Модель учитывает деформационное и компрессионное упрочнение, термическое разупрочнение, влияние скорости деформирования, переход от скольжения к двойникованию при высокоскоростном деформировании, а также описывает релаксацию упругого напряжения. Параметрическая идентификация уравнений проведена на основе большого числа экспериментов.

Ключевые слова: модель, упрочнение, вязкость, температура, релаксация, ударная волна, высокоскоростное деформирование, параметры.

Введение

Построением моделей поведения материалов при высокой скорости деформирования занимаются ученые разных стран с 70-80-х годов прошлого столетия [1–6]. Однако, несмотря на такую историю и достижения современных численных методов, разработка уравнений, определяющих связь тензора напряжения с тензором деформаций, в настоящее время остается по-прежнему актуальной, до конца не решенной задачей. Это связано прежде всего со сложностью процесса деформирования, которая проявляется в конкуренции различных механизмов деформации, в структурных изменениях, происходящих при этом, в нарушении устойчивости течения на различных масштабных уровнях и др. [7–10]. Модели, используемые в расчетах высокоскоростных динамических процессов, должны, с одной стороны, быть достаточно простыми и физически ясными, а с другой стороны, отражать основные процессы, происходящие в материалах, и "работать" в широком интервале параметров течения. В частности, определяющие уравнения должны отражать зависимость

тензора напряжений от параметров течения в данный момент времени и от истории деформации. Под историей деформации понимают зависимости температуры, давления, тензоров деформации и напряжения от времени. История деформации определяет структурные изменения, а именно рост плотности дислокаций, изменение размеров и ориентации зерен, относительное скольжение зерен, образование двойниковых структур и полос локализованного сдвига, отжиг при достижении критических температур [7–11]. Особую сложность представляет моделирование пластического деформирования в случае образования гетерогенной структуры течения на различных масштабных уровнях [6, 12].

В данной статье представлена релаксационная упругопластическая модель прочности пяти металлов — алюминиевого сплава АМгб, бериллия, меди, тантала и урана. Предложенная модель может использоваться в расчетах сложных динамических процессов, сопровождающихся высокой скоростью деформации, компрессионным и деформационным упрочнением.

Основные соотношения

Уравнения состояния, модуль сдвига и температура плавления. При построении определяющих уравнений твердого вещества, т. е. уравнений, связывающих тензор напряжения и тензор деформации, принято выделять девиаторный и шаровой тензоры напряжения:

$$\sigma_{ij} = S_{ij} - P\delta_{ij}.$$

Шаровой тензор напряжения

$$\sigma_{Sij} = -P\delta_{ij}$$

определяется плотностью и температурой веществ $P = F(\rho, E_T)$. В области давлений меньше 100 ГПа уравнение состояния (УРС) можно представить в упрощенной форме Ми–Грюнайзена:

$$P = \frac{\rho_{0K} C_{0K}^2}{n} (\delta^n - 1) + \Gamma_P \rho E_T, \quad (1)$$

$$E = \frac{C_{0K}^2}{n} \left(\frac{\delta^{n-1}}{n-1} + \frac{1}{\delta} - \frac{n}{n-1} \right) + E_T.$$

В выражениях (1) ρ_{0K} , C_{0K} — соответственно плотность и *объемная* скорость звука при $T = 0$ К; $\frac{\rho_{0K} C_{0K}^2}{n} (\delta^n - 1) = P_e$ — упругая составляющая давления; $\Gamma_P \rho E_T = P_T$ — тепловая составляющая давления; Γ_P — коэффициент Грюнайзена; ρ — плотность вещества; $\delta = \rho/\rho_{0K}$ — относительное сжатие; E , E_T — внутренняя и тепловая энергия соответственно ($E_T = c_V T$).

Коэффициент Грюнайзена Γ_P является функцией только плотности (или относительного сжатия δ) [13], что справедливо для не слишком высоких температур:

$$\Gamma_P = \Gamma_\infty + \frac{\Gamma_0 - \Gamma_\infty}{\delta M}, \quad (2)$$

Постоянные коэффициенты уравнений (1), (2)

Металл	ρ_{0K} , г/см ³	ρ_0 , г/см ³	ρ_{m0} , г/см ³	C_{0K} , м/с	n	Γ_∞	Γ_0	M	c_V , Дж/(г·К)	T_{m0} , К	P_m , ГПа
АМг6	2,69	2,64	2,524	5,55	3,2	0,67	2,14	1,2	0,9	933	115
Be	1,8668	1,85	1,707	8,03	2,89	0,5	1,25	1,0	2,7*	1557	220
Cu	9,054	8,93	8,384	3,95	4,3	0,67	1,96	1,2	0,391	1356	225
Ta	16,76	16,659	15,478	3,3	3,4	0,67	1,7	1,0	0,14	3290	280
²³⁸ U	18,9	18,7	17,76	2,62	4,6	0,7	2,3	3,4	0,105	1404	145

где Γ_0 , Γ_∞ — коэффициенты Грюнайзена (Γ_P) при $\rho = \rho_{0K}$ и $\delta \rightarrow \infty$ соответственно.

В табл. 1 представлены постоянные коэффициенты уравнений (1) и (2) для рассматриваемых металлов, подобранные на основании имеющихся экспериментальных данных [14–16]. Коэффициенты (1), (2) подобраны таким образом, чтобы при значениях $\rho = \rho_0$, $T = T_0$ и $\rho = \rho_{m0}$, $T = T_{m0}$, где ρ_0, T_0 — плотность и температура металла в нормальных условиях; ρ_{m0}, T_{m0} — плотность и температура плавления металла в нормальных условиях, полное давление $P \approx 0$, т. е. согласно формуле (1) $P_T \approx -P_e$.

На рис. 1 показаны результаты расчетов и экспериментальные данные по сжатию тантала и алюминиевого сплава АМг6 вдоль ударной адиабаты. Аналитические вычисления давления и плотности сделаны по формулам (1) и (2). УРС в форме Ми–Грюнайзена с параметрами, приведенными в табл. 1, описывает

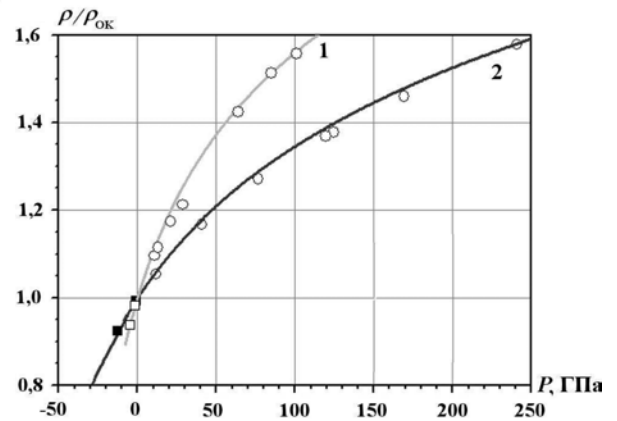


Рис. 1. Сжатие на ударной адиабате тантала (1) и алюминия (2): — — расчет по формулам (1) и (2); ○ — эксперимент [14]; ■, □ — расчетные значения P_T в точках $\rho = \rho_0$ и $\rho = \rho_{m0}$

Таблица 1

*Для бериллия $c_V = 2,7$ Дж/(г·К) при $T > \Theta$, где $\Theta = 1031$ К — температура Дебая.

ударное сжатие рассматриваемых металлов до $P = P_m$, где P_m — давление плавления.

Модуль сдвига, определяющий девиаторную составляющую тензора напряжения в упругой области деформации, рассчитывается по формуле

$$G = \frac{3}{2} \frac{1 - 2\nu}{1 + \nu} \rho C_B^2, \quad C_B^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S, \quad (3)$$

где ν — коэффициент Пуассона; C_B — текущая объемная скорость звука. Упругая C_L и объемная C_B скорости звука связаны соотношением

$$\nu = \frac{3C_B^2 - C_L^2}{3C_B^2 + C_L^2}.$$

Коэффициент Пуассона ν является функцией температуры $\nu(T/T_m)$ (T — текущая температура; T_m — температура плавления) и представляется в виде

$$\nu = \begin{cases} \nu_0 (1 + b_0 \bar{T}^K), & \bar{T} < 1; \\ 0,5, & \bar{T} \geq 1, \end{cases} \quad (4)$$

где $\bar{T} = T/T_m$; ν_0 , b_0 , K — константы. При определенном выборе параметров ν_0 , b_0 , K формула (4) описывает справочное значение ν при $T = 300$ К, а при $T = T_m$ $\nu = 0,5$, что соответствует жидкому состоянию.

В табл. 2 сведены параметры уравнения (4) для всех рассматриваемых металлов.

Температура плавления в заданном напряженно-деформированном состоянии определяется по закону Линдемана:

$$\frac{d(\ln T_m)}{d(\ln \rho_m)} = 2 \left(\Gamma_p - \frac{1}{3} \right), \quad (5)$$

где T_m — температура плавления при плотности ρ_m .

При начальных условиях $T_m = T_{m0}$, $\rho_m = \rho_{m0}$ уравнение кривой плавления в (δ, T) -плоскости имеет вид

Таблица 2

Постоянные коэффициенты уравнения (4)

Металл	ν_0	b_0	K
АМг6	0,322	0,55	3,0
Be	0,03	15,63	3,0
Cu	0,347	0,44	1,0
Ta	0,348	0,434	3,0
^{238}U	0,168	1,976	1,0

$$T_m = T_{m0} \left(\frac{\delta_m}{\delta_{m0}} \right)^{2(\Gamma_\infty - 1/3)} \times \exp \left(\frac{2(\Gamma_0 - \Gamma_\infty)}{M} \left(\frac{1}{(\delta_{m0})^M} - \frac{1}{(\delta_m)^M} \right) \right), \quad (6)$$

где $\delta_m = \rho_m/\rho_{0K}$; $\delta_{m0} = \rho_{m0}/\rho_{0K}$ — относительная плотность вещества при $T_m = T_{m0}$ (начало плавления).

На рис. 2—4 показаны расчетные зависимости коэффициента Пуассона ν , модуля сдвига G , упругой C_L и объемной C_B скоростей звука меди М1 и алюминиевого сплава АМг6 от давления, а также имеющиеся экспериментальные данные. На рис. 5, 6 показаны результаты расчетов и экспериментов для температуры и температуры плавления вдоль ударной адиабаты меди и бериллия.

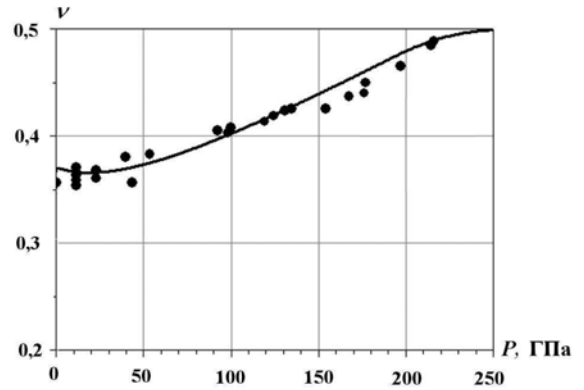


Рис. 2. Зависимость коэффициента Пуассона от давления для меди: — — расчет по формулам (1)–(6); • — эксперимент [17]

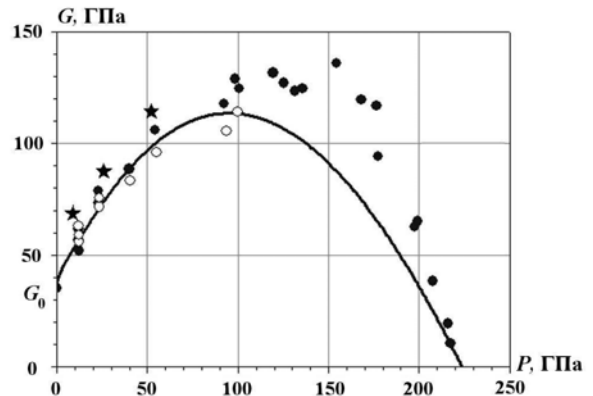


Рис. 3. Зависимость модуля сдвига от давления вдоль ударной адиабаты меди: — — расчет по формулам (1)–(6); •, *, o — эксперименты [17–19]

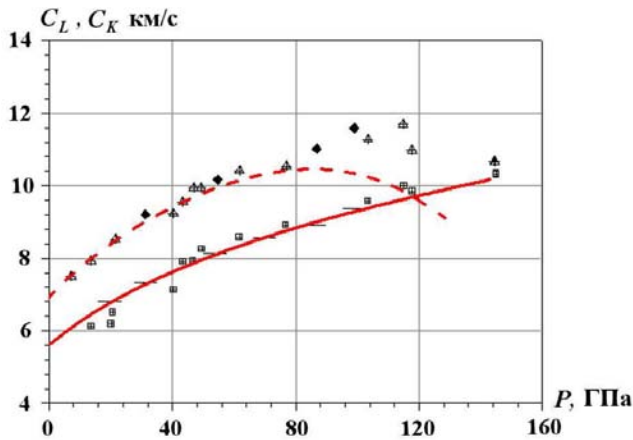


Рис. 4. Зависимости упругой C_L и объемной C_V скоростей звука от давления для алюминиевого сплава АМг6: — — расчет C_L по формулам (1)–(6); - - - — расчет C_V по формулам (1)–(6); маркеры — эксперимент [20]

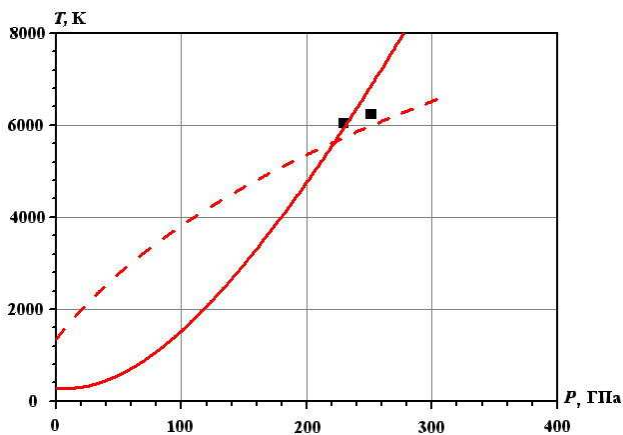


Рис. 5. Зависимости температуры и температуры плавления вдоль ударной адиабаты меди: — — расчет температуры по формулам (1)–(6); - - - — расчет температуры плавления по формулам (1)–(6); ■ — эксперимент [17]

Определяющие соотношения гомогенно-пластического деформирования. Обычно релаксационные уравнения строятся на основе уравнений максвелловской вязкой среды [22]. Согласно упругопластическому приближению при

$$S_{ij}^2 < \frac{2}{3}Y^2,$$

где Y — предел текучести, компонента девиатора

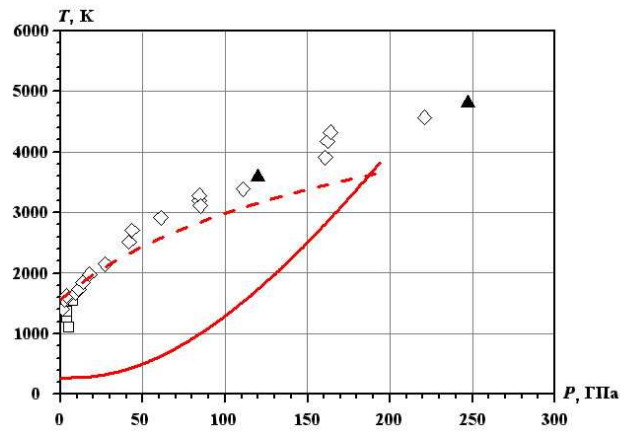


Рис. 6. Зависимости температуры и температуры плавления вдоль ударной адиабаты бериллия: — — расчет температуры по формулам (1)–(6); - - - — расчет температуры плавления по формулам (1)–(6); маркеры — экспериментальные данные [21]

тензора напряжения S_{ij} рассчитывается по закону Гука.

Для описания поведения металлов при высокоскоростном, в том числе ударно-волновом, деформировании применяются релаксационные модели упругопластического тела, в которых предполагается, что девиатор напряжений зависит от девиаторов деформаций, скоростей деформаций и времени [23].

Рассмотрим упрощенную релаксационную модель, в которой используется обычное упругопластическое приближение, а динамический предел текучести определяется дифференциальным уравнением, учитывающим процесс релаксации упругого напряжения. Данное упрощение сделано авторами совместно с П. Н. Низовцевым [24]. Основное уравнение, определяющее эффективный предел текучести в релаксирующей среде, следующее:

$$\dot{Y}_d = 3G\dot{\epsilon}_i - \frac{Y_d - Y_S}{\tau}, \quad (7)$$

где Y_d — эффективный предел текучести в данный момент времени; Y_S — стационарный предел текучести, реализующийся в данном состоянии (P, T) вещества при $\dot{\epsilon}_i = 0$; $\dot{\epsilon}_i$ — скорость деформации; τ — время релаксации упругого напряжения. В отличие от релаксационной модели для максвелловской среды, содержащей 3 уравнения, уравнение (7) значительно проще.

Для стационарного предела текучести используется упругопластическая модель пластического течения в следующей аналитической форме:

$$Y_S = Y_0 \left[1 + a_0 \left(1 - \bar{T}^k \right) \left(1 - \exp \left(- \frac{\varepsilon_i^p}{\varepsilon_1} \right) \right) \right] \frac{G}{G_0}, \quad (8)$$

где $\bar{T} = T/T_m$; ε_i^p — пластическая деформация; G_0 — модуль сдвига при нормальных условиях состояния; $Y_0, a_0, k, \varepsilon_1$ — константы.

В случае, когда $\tau \frac{d(\ln Y_d)}{dt} \ll 1$, для учета скорости деформирования применяется упруговязкопластическая модель:

$$Y_d = Y_S + 3G\tau\dot{\varepsilon}_i. \quad (9)$$

Здесь Y_S — стационарный предел текучести, выраженный уравнением (8); τ — время релаксации упругих напряжений; $G(P, T)$ — модуль сдвига. Сомножитель $G\tau = \mu$ иногда называют динамической вязкостью.

Параметры уравнений (8), (9) подбираются на основании имеющихся экспериментальных данных, полученных различными методами. Уравнения (8), (9) учитывают деформационное и компрессионное упрочнение, термическое разупрочнение, вязкость. По форме и физическому смыслу они близки к моделям Стейнберга—Гуинана и Армстронга—Зерилли [1, 3].

Для времени релаксации используется уравнение, описывающее эксперименты при высокой скорости деформирования во фронте УВ [24, 25], а при $\dot{\varepsilon}_i < 10^5 \text{ с}^{-1}$ — диаграммы сжатия и цилиндры Тейлора:

$$\tau = \frac{\tau_0 (1 - \bar{T})^2}{\frac{G}{G_0} \left(1 + \frac{\dot{\varepsilon}_i}{\dot{\varepsilon}_{i0}} \varphi(\dot{\varepsilon}_i) \right)^{0,5}}, \quad (10)$$

$$\varphi(\dot{\varepsilon}_i) = \frac{1 + \varphi_{\max} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_i}{\dot{\varepsilon}_{0S}} \right)^n}{1 + \left(\frac{\dot{\varepsilon}_i}{\dot{\varepsilon}_{0S}} \right)^n},$$

где $\tau_0, \dot{\varepsilon}_{i0}, \varphi_{\max}, \dot{\varepsilon}_{0S}, n$ — постоянные коэффициенты. Уравнение (10) имеет следующие предельные значения: при $\dot{\varepsilon}_i \rightarrow 0$ $G = G_0, \tau = \tau_0(1 - \bar{T})^2$; при $\bar{T} \rightarrow 1$ или $\dot{\varepsilon}_i \rightarrow \infty$ $\tau \rightarrow 0$.

Параметрическая идентификация модели проведена на основе данных различных экспериментов — диаграммы сжатия, данных, полученных методом Тейлора, методом регистрации развития возмущений, профилей скорости свободной поверхности ударно-нагруженных металлов, результатов регистрации упругого предвестника, измерений ширины фронта УВ и др. В табл. 3 приведены параметры уравнений (7)—(10) для всех рассматриваемых металлов.

Приведенные в табл. 3 значения параметров девиатора напряжений являются приближенными. При получении новых, дополнительных результатов экспериментов возможно их уточнение. Вместе с тем построенные определяющие уравнения (шаровая и девиаторная составляющие) могут быть рекомендованы для выполнения расчетов в тех случаях, когда ударно-волновые нагрузки не превышают 100 ГПа.

На рис. 7 показана расчетная зависимость интенсивности напряжения от скорости деформации при $\varepsilon_i = 0,002$, а на рис. 8 — расчетная зависимость скорости деформации во фронте УВ от давления меди. Там же приведены имеющиеся экспериментальные данные.

Из рис. 7 видно, что расчетная кривая имеет перегиб в области скоростей деформирования $\sim 10^5 \div 10^6 \text{ с}^{-1}$, что соответствует смене режима деформирования со скольжения на двойникование меди. Для других металлов получены аналогичные зависимости.

Таблица 3

Постоянные коэффициенты уравнений (7)—(10)

Металл	$Y_0,$ ГПа	a_0	k	ε_1	$G_0,$ ГПа	$\tau_0,$ мкс	$\dot{\varepsilon}_{i0},$ с^{-1}	φ_{\max}	$\dot{\varepsilon}_{0S},$ с^{-1}	n
АМгб	0,20	1,4	5,0	0,1	26	2,28	1,0	0	—	0
Be	0,36	3,3	1,0	0,143	160	5,0	1,0	156	$2 \cdot 10^3$	1
Cu	0,055	9,0	1,0	0,31	40	25,0	0,25	100	10^6	1
Ta	0,44	1,4	1,0	0,5	70	5,0	0,5	0	—	0
^{238}U	0,4	3,1	1,0	0,154	85	5,0	70,0	250	10^6	2

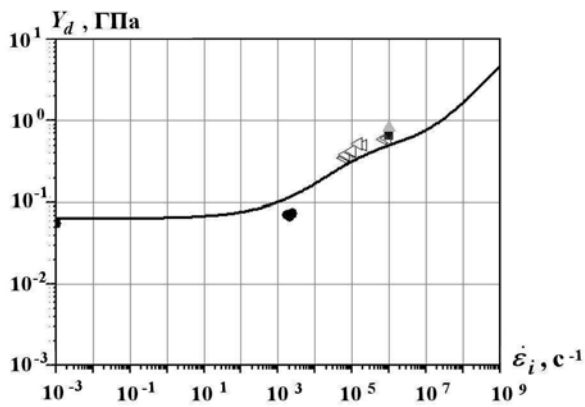


Рис. 7. Зависимость динамического предела текучести от скорости деформации меди: — — расчет по формулам (8)–(10) при $\varepsilon_i = 0,002$; ● — эксперимент [11]; ▼, ▲, ■ — эксперимент [26]; ◁ — эксперимент [27]

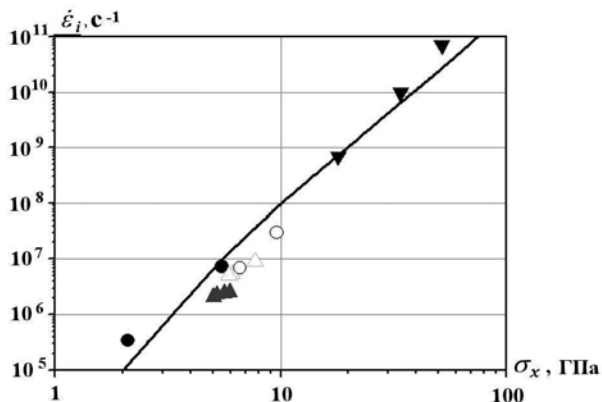


Рис. 8. Зависимость скорости деформации меди от интенсивности нагружения во фронте УВ: — — расчет по формулам (8)–(10); ● — эксперимент [25]; ○ — эксперимент [28]; ▲, △ — эксперимент [29]; ▼ — эксперимент [30]

Сравнение с экспериментальными данными

Определение предела текучести при высоких давлениях непосредственно из экспериментов, как правило, невозможно. В известных авторам экспериментальных методиках измеряется чувствительная к сдвиговой прочности величина. Предел текучести в исследованной области деформирования вычисляется с использованием расчетно-экспериментального метода, суть которого заключается в следующем.

При заданной физической и математической форме определяющего уравнения путем сопо-

ставления опытных и расчетных результатов осуществляется выбор или корректировка численных параметров математической модели, при которой обеспечивается адекватное описание расчетом первичных экспериментальных данных. Чем шире класс используемых для тестирования экспериментов — от статических до ударно-волновых, тем точнее выбранная форма модели и параметры. Точность определенной таким образом сдвиговой прочности зависит от точности измеряемых в экспериментах параметров.

Для тестирования представленной модели использовались следующие экспериментальные данные: статические (σ, ε) -диаграммы сжатия; данные, полученные методами составного стержня Гопкинсона (ССГ) и Тейлора, измерением скоростей звука; результаты регистрации роста возмущений, затухания упругого предвестника, измерений ширины фронта УВ и др. Представить в статье описание моделью всех экспериментальных данных не представляется возможным. Ниже для рассматриваемых металлов приведены лишь отдельные, наиболее значимые результаты. Расчеты в одномерной и двумерной постановках проведены по численной методике ДРАКОН [31], в которую предварительно введена предложенная модель сдвиговой прочности рассматриваемых металлов. Исходная информация по экспериментальным данным указана в соответствующих ссылках.

Алюминиевый сплав АМг6. На рис. 9 представлены результаты моделирования экспериментальных данных, полученных методом ССГ для алюминиевого сплава АМг6 [32] при нормальной температуре и скорости деформирования $\dot{\varepsilon}_i \sim 10^3 \text{ с}^{-1}$. Применять модель алюминия рекомендуется с $\dot{\varepsilon}_i \sim 10^2 \text{ с}^{-1}$.

Расчетные и экспериментальные зависимости безразмерных конечных длин (L_f/L_0) , где L_f — конечная длина, L_0 — начальная длина) цилиндрических образцов из АМг6 от скорости их соударения о жесткую преграду, полученные методом цилиндров Тейлора [33, 34], показаны на рис. 10. Там же для сравнения показаны данные для алюминия АД1.

На рис. 11 показаны результаты описания с использованием представленной модели экспериментальных данных [35], полученных методом регистрации развития возмущений в алюминиевом сплаве АМг6 при квазиизэнтропическом нагружении до давления $P \sim 35 \text{ ГПа}$.

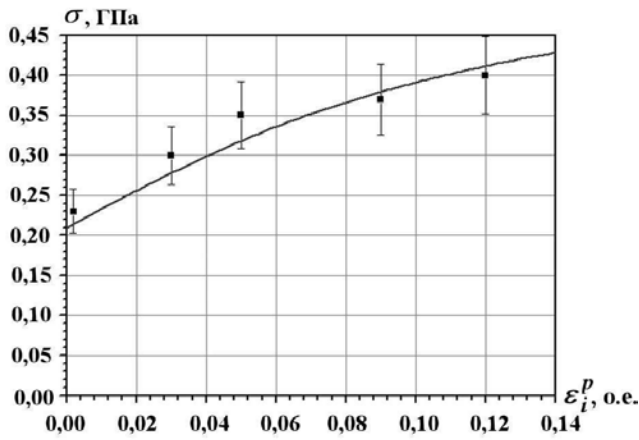


Рис. 9. Пластический участок (σ, ε_i) -диаграммы сжатия алюминиевого сплава АМг6 при $\dot{\varepsilon}_i \sim 10^3 \text{c}^{-1}$, $T = 293 \text{ К}$: — — расчет; ■ — эксперимент [32]

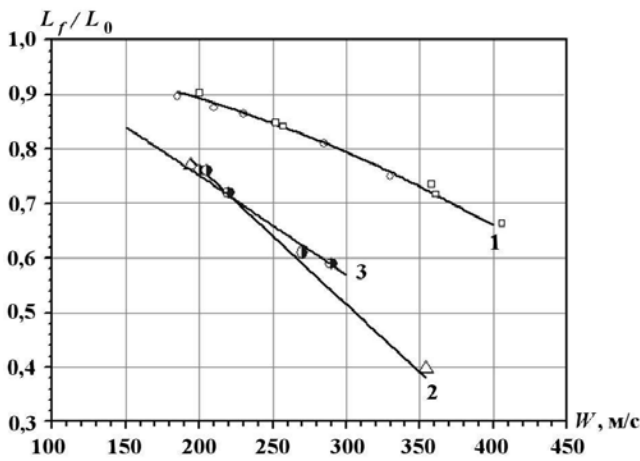


Рис. 10. Зависимости L_f/L_0 от скорости соударения W : 1 — АМг6, $T = 293 \text{ К}$; 2 — АМг6, $T = 725 \text{ К}$; 3 — АД1; — — расчет; маркеры — эксперимент

Бериллий. В работах [36, 37] приведены результаты исследования бериллия марок S200F, S200D и S200E с размером зерна от 11,4 до 27 мкм. Анализ имеющихся диаграмм сжатия показывает, что бериллий марки S200F с размером зерна от 11,4 мкм является довольно пластичным, особенно это проявляется при повышенных температурах и скоростях деформирования. Авторы работы [37] связывают данный эффект с появлением большого количества деформационных двойников, обнаруженных при микроструктурном анализе образцов после испытаний методом ССГ при нормальной температуре, деформации до 7% и скорости деформирования 1500c^{-1} . Все имеющиеся диаграммы

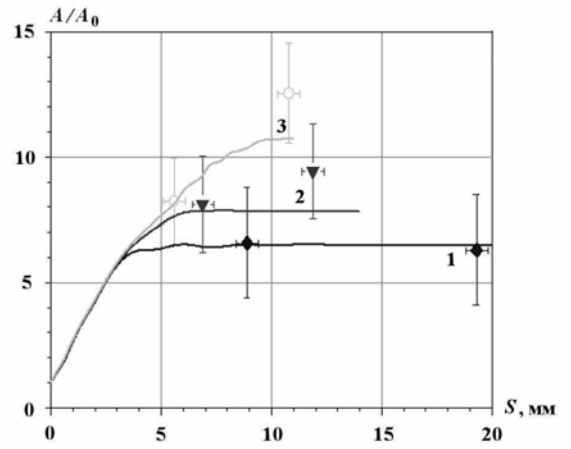


Рис. 11. Зависимости относительной амплитуды A/A_0 (A_0 — начальная амплитуда) возмущения от смещения S пластины алюминиевого сплава АМг6: 1 — $A_0 = 0,06 \text{ мм}$; 2 — $A_0 = 0,11 \text{ мм}$; 3 — $A_0 = 0,15 \text{ мм}$; — — расчет; маркеры — эксперимент

указывают на достаточно сложную зависимость поведения бериллия от скорости деформирования и температуры.

В РФЯЦ-ВНИИЭФ проведены испытания бериллия (марки В-1 без отжига) методом ССГ на сжатие при скорости деформирования 1550c^{-1} [38]. В работе [1] отмечено максимальное значение прочности при сжатии $Y_{\text{max}} = 1230 \text{ МПа}$, однако экспериментального подтверждения этого значения в [1] нет. На рис. 12 представлены результаты описания моделью имеющихся экспериментальных данных.

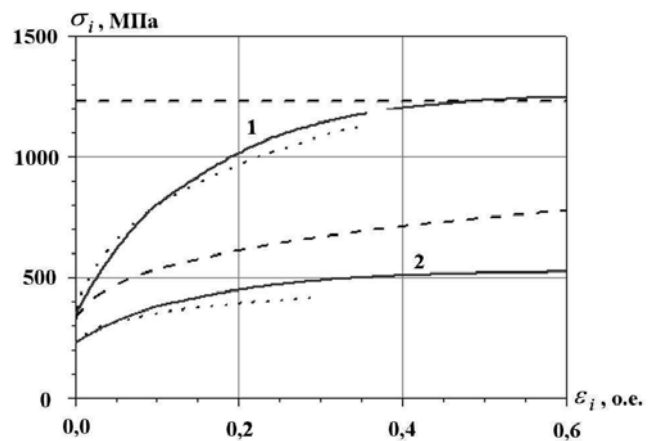


Рис. 12. (σ, ε) -диаграммы сжатия бериллия при $T = 20^\circ \text{C}$ (1) и $T = 300^\circ \text{C}$ (2) и скорости деформирования $\dot{\varepsilon}_i = 2 \cdot 10^{-4} \text{c}^{-1}$: — — расчет по (8); --- — расчет по модели Стейнберга [1]; ... — эксперимент [36]

Влияние деформации и ее скорости можно оценить из моделирования динамического деформирования одноосного сжатия цилиндров Тейлора [39]. В работе [40] (данные Ю. И. Мещерякова) зарегистрированы профили упругого предвестника и пластической волны при нагружении бериллия УВ. На рис. 13 приведены результаты расчетного описания экспериментальных данных из работы [40].

Расчетная и экспериментальная зависимости скорости деформации во фронте УВ от ее амплитуды приведены на рис. 14.

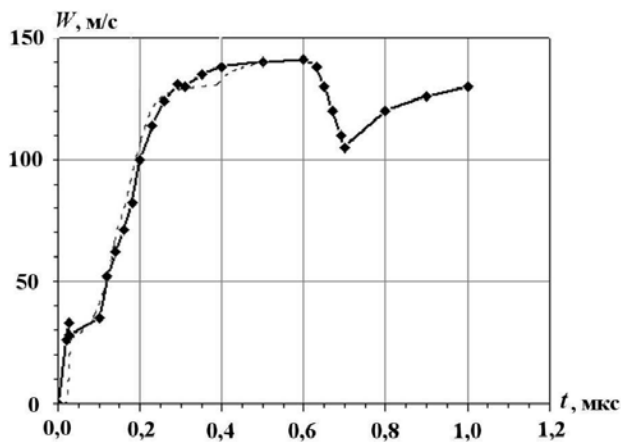


Рис. 13. Зависимость скорости свободной поверхности от времени для бериллия: - - - - расчет с использованием модели ($\Delta_{обр} = 3,96$ мм; $\Delta_{уд} = 1,88$ мм; $W = 147,3$ м/с; ударник из Д-16); —◆— эксперимент [40]

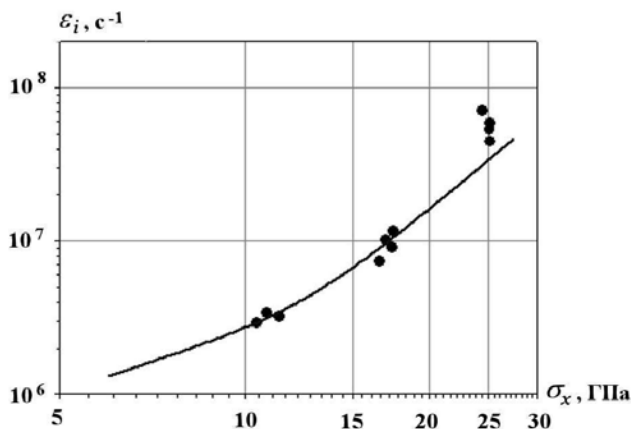


Рис. 14. Зависимость скорости деформации от амплитуды УВ для бериллия: — — расчет с использованием модели; • — эксперимент [25]

Медь. Тестирование модели прочности крупнокристаллической (размер зерна 110 мкм) меди марки М1 проведено на основании широкого класса экспериментальных данных [11, 25—29, 41—44]. На рис. 2, 3, 5—8 показаны некоторые результаты численного моделирования.

Результаты моделирования экспериментальных данных, полученных другими методами, можно найти в работах [10, 42—44].

Тантал. На рис. 15 (см. также цветную вкладку) приведены (σ, ϵ) -диаграммы сжатия крупнокристаллического тантала марки ТВЧ при нормальной температуре и разных скоростях деформации — от 10^{-3} до 10^3 с $^{-1}$. Из сравнения представленных результатов видно, что тантал в диапазоне скоростей деформаций от 0,001 до 800 с $^{-1}$ обладает сильной зависимостью предела текучести от скорости деформации. В целом зависимость предела текучести от скорости деформации в диапазоне скоростей деформации от 0,001 до 2000 с $^{-1}$ носит сложный характер [45].

В РФЯЦ-ВНИИЭФ [45] и в Лос-Аламосской национальной лаборатории (LANL) [46] методом Тейлора проведены исследования тантала при нормальной и повышенных температурах. На рис. 16 (см. также цветную вкладку) приведены экспериментальные результаты и результаты расчетов с использованием модели.

Параметры модели также определялись с использованием данных по затуханию упругого предвестника [47] или профиля скорости свободной поверхности (U) после нагружения танта-

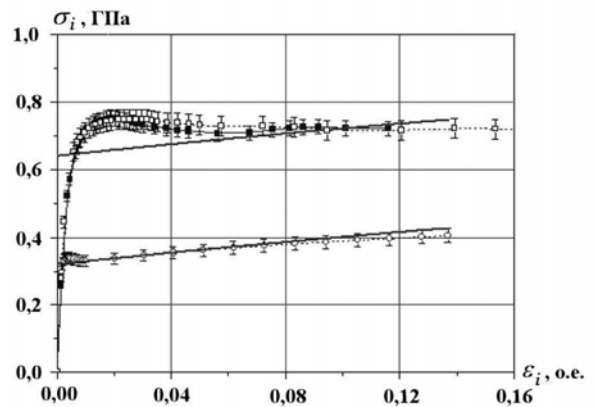


Рис. 15. (σ, ϵ_i) -диаграммы сжатия крупнокристаллического тантала при статическом и динамическом деформировании: — — расчеты; маркеры — эксперименты

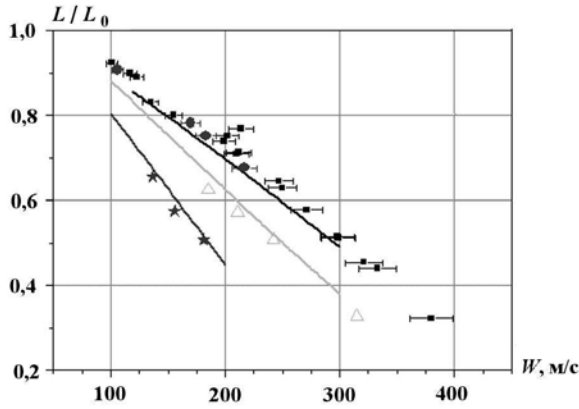


Рис. 16. Зависимости относительного изменения длины цилиндрических образцов от скорости соударения, полученные методом Тейлора: ■ — эксперимент LANL, $T = 293$ К; \triangle — эксперимент LANL, $T = 727$ К; * — эксперимент LANL, $T = 1290$ К; • — эксперимент РФЯЦ-ВНИИЭФ, $T = 293$ К; —, — — расчеты ВНИИЭФ

ла, полученных с помощью лазерного интерферометра и методом развития возмущений.

Уран. В работе [48] представлены статические ($\dot{\epsilon} \approx 10^{-3} \text{ c}^{-1}$, $T_0 = 20^\circ \text{C}$) (σ, ϵ)-диаграммы сжатия и растяжения урана в исходном состоянии после предварительного ударно-волнового нагружения до давления ~ 20 , ~ 30 и ~ 40 ГПа. В LANL получены (σ, ϵ)-диаграммы сжатия обедненного урана при различных температурах ($T_0 = 20 \div 300^\circ \text{C}$) и скоростях деформирования ($\dot{\epsilon} \approx 10^{-3} \div 3,4 \cdot 10^3 \text{ c}^{-1}$) [49]. Эти диаграммы использовались при выборе параметров деформационного упрочнения урана.

С помощью лазерного интерферометра Фабри—Перо зарегистрированы скорости свободной поверхности урановых образцов различной толщины ($h = 0,5 \div 10$ мм) при нагружении ~ 17 ГПа [50]. Данные, полученные в работе [50], указывают на сложный и, скорее всего, гетерогенный характер деформирования урана. Это проявляется в реализации различной формы упругого предвестника в пределах лазерного пятна: от классической ступеньки до плавного спада интенсивности до 0 (рис. 17). Расчетные и экспериментальные данные по затуханию упругого предвестника приведены на рис. 18.

Для тестирования параметров модели урана также использовались экспериментальные данные, полученные методами схождения цилин-

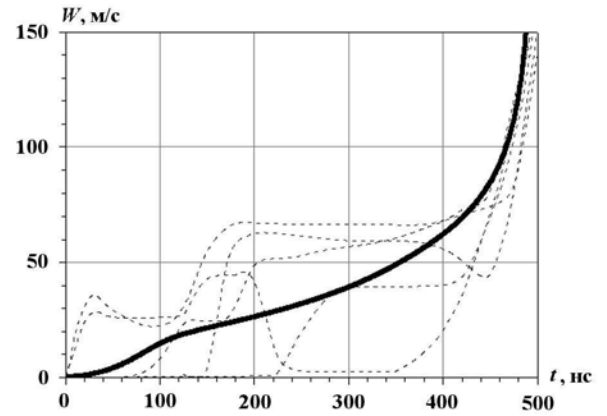


Рис. 17. Зависимости скорости свободной поверхности от времени для шести интерференционных линий, полученных в одном эксперименте, $h = 10$ мм: — — расчет; - - - — эксперимент [50]

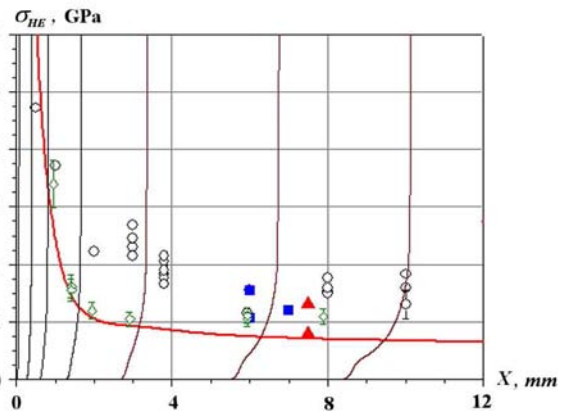


Рис. 18. Затухание упругого предвестника в ^{238}U : —, — — расчет; маркеры — эксперименты [50—52]

рических оболочек, регистрации развития возмущений при ударно-волновом и квазиизэнтропическом нагружении и регистрации скорости свободной поверхности ударно-нагруженных образцов.

Заключение

Описаны определяющие соотношения для расчетов деформации и сжатия пяти металлов — алюминиевого сплава АМг6, бериллия, меди М1, тантала марки ТВЧ, природного урана. Представлены аналитическая форма и параметры. Модель учитывает деформационное и компрессионное упрочнение, термическое разупрочнение, а также релаксацию упругого напряжения; в неявном виде она учитывает (через параметр

φ в уравнении (10)) сложную зависимость предела текучести от скорости деформации. Параметры и форма модели оттестированы по широкому классу экспериментальных данных, полученных различными методами. Точность вычисляемого предела текучести зависит от точности измеряемых в экспериментах параметров и составляет $Y_d \pm 20\%$, а область применимости модели определяется областью имеющих экспериментальных данных: $P \leq 100$ ГПа; $\dot{\epsilon}_i \leq 10^7 \text{с}^{-1}$.

Модель не учитывает процессы, связанные с изменением внутренней структуры при интенсивных нагрузках, и соответственно связанные с этим изменения механических свойств, такие как уменьшение размера зерна, образование двойников, гетерогенное разупрочнение и др. Тем не менее ее можно применять для расчета осредненных параметров течения.

Список литературы

1. *Steinberg D., Cochran S., Guinan M.* A constitutive model for metals applicable at high-strain rate // *J. Appl. Phys.* 1980. Vol. 51, No 3. P. 1496—1504.
2. *Steinberg D. J., Lund C. M.* A constitutive model for strain rates from 10^{-4} to 10^6s^{-1} // *Ibid.* 1989. Vol. 65. P. 1528—1536.
3. *Zerilli F. J., Armstrong R. W.* Dislocation-mechanics-based constitutive relation for material dynamics calculation // *Ibid.* 1987. Vol. 61, No 5. P. 1816—1825.
4. *Гилман Дж. Дж.* Динамика дислокаций и поведение материалов при ударном воздействии // *Механика.* 1970. № 2. С. 96—134.
5. *Steinberg D., Sharp R.* Interpretation of shock data for beryllium and uranium with elastic-viscous-plastic constitutive model // *J. Appl. Phys.* 1981. Vol. 52, No 8. P. 5072—5083.
6. *Swegle J., Gready D.* Calculation of thermal trapping in shear bands // *Metallurgical Application of Shock-Wave and High-Strain Rate Phenomena.* New-York and Basel, 1986. P. 705—722.
7. *Мейерс М. А., Мурр Л. Е.* Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов. М.: Металлургия, 1984.
8. *Энштейн Г. Н.* Строение металлов, деформированных взрывом. М.: Металлургия, 1988.
9. *Раевский В. А., Подурец А. М., Ханжин В. Г. и др.* Двойниковые структуры в меди после ударного и безударного высокоскоростного деформирования // *Тр. междунац. конф. "IX Харитоновские науч. чтения"*. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 424—428.
10. *Глазков В. С., Игнатова О. Н., Малышев А. Н. и др.* Метод исследования особенностей высокоскоростного деформирования металлов на микро- и мезомасштабных уровнях // *Физическая мезомеханика.* 2010. Т. 13, № 3. С. 61—68.
11. *Новиков С. А., Игнатова О. А., Кошатов Е. В. и др.* Исследование поведения меди с различным размером зерна при динамическом деформировании. // *Изв. Российской академии ракетных и артиллерийских наук.* 2004. № 4(41). С. 102—108.
12. *Низовцев П. Н., Раевский В. А., Игнатова О. Н.* Феноменологическая модель высокоскоростного деформирования, учитывающая гетерогенное деформирование металлов // *Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ.* 2004. № 7. С. 318—329.
13. *Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е.* Уравнение состояния сжатых и нагретых металлов // *Теплофизика высоких температур.* 1987. № 1. С. 42—51.
14. *Жерноклотов М. В., Зубарев В. Н., Трунин Р. Ф., Фортвов В. Е.* Экспериментальные данные по ударной сжимаемости и адиабатическому расширению конденсированных веществ при высоких плотностях энергии. Черногловка, 1996.
15. *Зиновьев В. Е.* Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справочник. М.: Металлургия, 1989.
16. *Marsh S. P.* LASL Shock Hugoniot Data. University of California Press, 1979.
17. *Hayes D., Hixson R. S., McQueen R. G.* High pressure elastic properties, solid-liquid phase boundary and liquid equation of state from release wave measurements in shock-loaded copper // *Proc. of Int. Conf. "Shock Compression of Condensed Matter-1999"*. Snowbird, June 27 — July 2. P. 483—487.
18. *Rudin S. P., Jones M. D.* First-principles-based thermodynamic description of solid

- copper using the tight-binding approach // Phys. Rev. 2002. В 65. P. 235114.
19. Peng J., Jing F., Li D. Pressure and temperature dependence of shear modulus and yield strength for aluminum, copper, and tungsten under shock compression // J. Appl. Phys. 2005. Vol. 98. P. 013508.
 20. Reinhart W. D., Asay J. R., Chhabildas L. C., Alexander C. S. Investigation of 6061-T6 aluminum strength properties to 160 GPa // Proc. of Int. Conf. "Shock Compression of Condensed Mater-2009". Nashville, June 28 — July 3, 2009. P. 977—980.
 21. Legrand Ph., Robert G. First-principles thermoelasticity of beryllium // Ibid. P. 513—516
 22. Орленко Л. П. Физика взрыва. Т. 2. М.: Физматлит, 2002.
 23. Годунов С. К., Роменский Б. И. Нестационарные уравнения нелинейной теории упругости в эйлеровых координатах // ПМТФ. 1972. № 6. С. 124—144.
 24. Лебедев А. И., Игонин В. В., Низовцев П. Н. и др. Исследования неустойчивости свободной поверхности твердых тел при ударно-волновом нагружении // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2001. Вып. 1. С. 590—597.
 25. Swegle J. W., Grady D. E. Shock viscosity and the prediction of shock wave rise times // J. Appl. Phys. 1985. Vol. 58(2). P. 692—701.
 26. Wang Z., Beyerlein I., LeSar R. Plastic anisotropy of FCC single crystals in high-rate deformation // 8th World Congress on Computational Mechanics. Venice, Italy. June 30 — July 5, 2008.
 27. Tong W., Clifton R., Huang S. Pressure-shear impact investigation of strain rate theory effects in oxygen-free high-conductivity copper // J. Mech. Phys. Solids. 1992. Vol. 40. P. 1251—1294.
 28. Разорёнов С. В., Канель Г. И. Измерение ширины фронта ударной волны в меди // Механика быстро протекающих процессов. Новосибирск, 1984.
 29. Гаркушин Г. В., Разорёнов С. В., Игнатова О. Н. Влияние внутренней структуры меди М1 на упругопластические и прочностные свойства при ударно-волновом нагружении // Деформация и разрушение материалов. 2008. № 4. С. 38—43.
 30. Jarmakani H., McNaney J. M., Kad B. et al. Dynamic response of single crystalline copper subjected to quasi-isentropic, gas-gun driven loading // Mat. Sci. and Eng. 2007. A 463. P. 249—262.
 31. Абакумов А. И., Низовцев П. Н., Певницкий А. В., Соловьев В. П. Программный комплекс ДРАКОН для расчета упругопластических течений при ударно-волновом нагружении в двумерном и трехмерном приближении // IV Забабахинские чтения. Доклады межд. конф. Снежинск, 1995. С. 227—228.
 32. Пушков В. А., Синицын В. А., Глушак Б. Л. и др. Динамическое деформирование алюминиевого сплава АМг6 при нормальной и повышенной температурах // ПМТФ. 2000. Т. 41, № 6. С. 139—143.
 33. Глушак А. Б., Новиков С. А. Сопротивление металлов пластической деформации при высокоскоростном сжатии // Химическая физика. 2000. Т. 19, № 2. С. 65—69.
 34. Jones S., Jills P., Foster J. On the equation of motion of the underformed section of a Taylor impact // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 61, No 2. P. 499 — 502.
 35. Lindquist M. J., Graham, Cavallo R. M. et al. Aluminium Rayleigh-Taylor strength measurements and calculation // 10th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. Paris, July 2006. P. 89—94.
 36. Montoya D., Naulin G., Ansart J. P. Comportement dynamique d'une nuance de beryllium // 3rd Int. Conf. on Mechanical and Physical Behaviour of Materials under Dynamic Loading. Journal de Physique. 1991. IV. P. 3—27.
 37. Blumenthal W. R., Abeln S. P., Cannon D. D. et al. Influence of strain rate and temperature on the mechanical behavior of beryllium // Proc. of Shock Compression of Condensed Matter. 1997. P. 411—414.
 38. Батяков Ю. В., Большаков А. П., Глушак Б. Л. и др. Деформационные и прочностные характеристики бериллия при высоких скоростях нагружения (обзор). М.: ЦНИИАтоминформ, ВНИИЭФ, 1990.

39. *Wilkins M. L., Guinan M. W.* Impact of cylinders on rigid boundary // *J. Appl. Phys.* 1973. Vol. 44. P. 1200–1206.
40. *Мещеряков Ю. И., Булатов В. П.* Исследование динамической прочности и пластичности поликристаллического бериллия. М.: Институт проблем машиноведения РАН, 2001.
41. *Глазков В. С., Игнатова О. Н., Малышев А. Н. и др.* Метод исследования особенностей высокоскоростного деформирования металлов на микро- и мезомасштабных уровнях // *Физическая мезомеханика.* 2010. Т. 13, № 3. С. 61–68.
42. *Игнатова О. Н., Каганова И. И., Малышев А. Н. и др.* Влияние ударно-волнового нагружения на внутреннюю микроструктуру и механические свойства мелкозернистой меди // *ФГВ.* 2010. Т. 46. № 6. С. 1–6.
43. *Lebedev A. I., Nizovtsev P. N., Rayevsky V. A., Soloviev V. P.* Rayleigh-Taylor instability in Strong Media. Experimental Study // *Proc. of 5th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing.* New York, July 18–21, 1995. P. 231–236.
44. *Raevsky V. A., Aprelkov O. N., Ignatova O. N. et al.* Development of wide-range constitutive equations for calculations of high-rate deformation of metals // *Int. Conf. "New models and hydrocodes ..."*. Paris, May 23–28, 2010.
45. *Аниськин М. В., Игнатова О. Н., Каганова И. И. и др.* Механические свойства тантала с различной микроструктурой при высокоскоростном деформировании // *Физическая мезомеханика.* 2010. Т. 13, № 4. С. 65–71.
46. *Gust W.* High impact deformation of metal cylinders at elevated temperatures // *J. Appl. Phys.* 1982. No 5. P. 3566.
47. *Gills P., Hage K., Wasley R.* Elastic precursor decay in tantalum // *Ibid.* 1971. Vol. 42, No 5. P. 2145–2146.
48. *Андреева М. А., Большаков А. П., Игнатова О. Н.* Исследование механических свойств урана U-238 с различной исходной структурой при скорости деформирования 10^{-3} – 10^3 1/с // *Физическая мезомеханика.* 2010. Т. 13, № 1. С. 107–112.
49. *Blumenthal W. R., Cerreta E. K., Dennis-Koller D. et al.* Recent dynamic strength testing of uranium // *7th Int. Workshop on the Fundamental Properties of Plutonium.* RFNC-VNIIEF. Sarov, Russia, June 25–29, 2007.
50. *Федоров А. В., Михайлов А. Л., Финюшин С. А. и др.* Регистрация дисперсии скорости упругой волны в природном уране // *Тр. межд. конф. "VII Харитоновские темат. науч. чтения"*. Саров, 14–18 марта 2005 г. С. 408–415.
51. *Большаков А. П., Квасков Г. А., Новиков С. А. и др.* Механические свойства урана при квазистатическом и ударно-волновом нагружении: Препринт № 54. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1997.
52. *Gredy D. E.* Steady-wave risetime and spall measurements on uranium (3–15 GPa) // *Metallurgical Application of Shock-Wave and High-Strain-Rate Phenomena / Ed. L. E. Murr, K. P. Standhammer, M. A. Meyers.* New-York and Basel, 1986. P. 703–804.

Статья поступила в редакцию 16.06.11

УДК 517.958 + 519.64

К ДОКАЗАТЕЛЬСТВУ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ ЛИНЕЙНОГО ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА И ИНТЕГРАЛЬНОГО ТРАНСПОРТНОГО УРАВНЕНИЯ ТИПА УРАВНЕНИЯ ПАЙЕРЛСА

А. Н. Субботин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Приводится нетрадиционный вывод линейного интегродифференциального кинетического уравнения Больцмана из интегрального транспортного уравнения типа уравнения Пайерлса. Обсуждается *геометрический* смысл различных форм уравнения переноса, получаемых в процессе преобразований.

Ключевые слова: линейная теория переноса, линейное интегродифференциальное кинетическое уравнение, интегральное уравнение переноса частиц.

Введение

В линейной теории переноса частиц основным объектом изучения является интегродифференциальное кинетическое уравнение, часто называемое линейным уравнением Больцмана [1–7]. Построение некоторых схем математического моделирования процессов переноса, например, построение оценок в методе Монте-Карло [7–9] или численные расчеты переноса теплового излучения [10–12] основываются на интегральной форме уравнения переноса типа уравнения Пайерлса [13]. Как правило, обоснование эквивалентности этих двух форм уравнения переноса ведется по схеме вывода интегрального уравнения из интегродифференциального. Обратный переход, достаточно обычный для нелинейной теории [14], в литературе по линейной теории практически не встречается. В статье Алвина М. Вейнберга [3] имеется замечание, что обратный переход не представляет труда. Однако указание Вейнберга продифференцировать по t нестационарное интегральное уравнение трудно с математической точки зрения признать полным и строгим выводом уравнения. Особое место в теории переноса занимает развитая М. В. Масленниковым аксиоматическая модель явлений переноса, начинающаяся с вывода соотношения баланса частиц в конечном фазовом объеме [15]. Это так называемое обобщенное интегральное уравнение переноса непосредственно связывает физически наблюдаемые величины. Из такого интегрального соотношения при дополнительных предположениях следует вывод дифференциальной формы уравнения переноса, которое в простейшем частном случае совпадает с классическим линейным кинетическим уравнением. Аксиоматический подход требует виртуозного владения аппаратом теории меры. При этом М. В. Масленников подчеркивает, что "судьба отдельной частицы в конечном итоге нас интересовать не будет" и при построении обобщенной теории вероятностные понятия используются время от времени "лишь во вспомогательных рассуждениях и наводящих соображениях на физическом уровне строгости". В работах [10–12] вопрос об эквивалентности так называемого *дополнительного* интегрального уравнения интегродифференциальному уравнению вообще был оставлен открытым.

В статье построен переход от интегрального транспортного уравнения к линейному интегродифференциальному кинетическому уравнению. Первый раздел содержит предварительные сведения из линейной теории переноса частиц. Процессы, описываемые уравнениями переноса, являются по существу вероятностными. В статье использование вероятностной теории не выходит за рамки понятия плотности распределения случайной величины. Предполагается, что все рассматриваемые

функции *хорошие* и допускают законность всех преобразований. Сам результат преобразований не является неожиданным, и интересен скорее путь доказательства и получаемые "попутно" известные формы интегрального уравнения, имеющие прозрачный физический и вероятностный смысл. Сопоставление смысла интегрального уравнения для плотности эмиссии частиц с комментарием работ [10–12] к методу коэффициентов ослабления позволяет утверждать, что в этих работах реализована явная схема решения интегрального транспортного уравнения для эмиссии частиц.

1. Основные физические предположения линейной теории переноса. Разложение решения уравнения переноса в ряд Неймана

В классической линейной теории переноса интегродифференциальное кинетическое уравнение для плотности одного типа нейтральных частиц (нейтронов, гамма-квантов) в предположении отсутствия размножения можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)}{\partial t} + V\vec{\omega} \cdot \nabla n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) + V\Sigma(\vec{r}, V) n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) = \\ = \int V' \Sigma(\vec{r}, V') n(t, \vec{r}, \vec{\omega}', V') C(\vec{r}; \vec{\omega}', V' \rightarrow \vec{\omega}, V) d\vec{\omega}' dV' + n_0(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)$ — плотность частиц, имеющих в момент времени t в точке \vec{r} скорость V в направлении $\vec{\omega}^1$; $\nabla n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) = \frac{dn}{d\vec{r}}$ — градиент плотности по пространственным (конфигурационным) переменным; $\Sigma(\vec{r}, V)$ — полное макроскопическое сечение; $C(\vec{r}; \vec{\omega}', V' \rightarrow \vec{\omega}, V)$ — плотность распределения новых параметров $(\vec{\omega}, V)$ состояния частицы при условии, что частица столкнулась в точке $(\vec{r}, \vec{\omega}', V')$; $n_0(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)$ — плотность частиц, испущенных независимыми источниками.

Основные идеализирующие предположения для вывода уравнения (1):

1. Частица рассматривается как классическая точечная частица, для которой в любой момент времени полностью определено положение в пространстве координат и скоростей.
2. Вероятности всех элементарных актов взаимодействия частицы с веществом среды не зависят от предыстории и определяются природой этой частицы и свойствами вещества.
3. Вторичные частицы, возникающие в результате взаимодействия, рождаются в той же точке пространства, где произошло столкновение.
4. Частица между столкновениями движется прямолинейно и равномерно.
5. Среда изотропна, находится в стационарном состоянии, и столкновения частиц с веществом не меняют этого состояния.
6. Концентрация частиц в среде мала настолько, что вероятность взаимодействия их друг с другом пренебрежимо мала.
7. Функцию распределения числа частиц в элементе фазового объема можно описывать плотностью частиц $n(x)$ в точке x непрерывного фазового пространства: $N(dx) = n(x)dx$.

В этих предположениях уравнение (1) в математической физике получается предельным переходом $\Delta\vec{r} \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ (дифференцируемость предполагается) из уравнения для изменений, происходящих в балансе коллектива частиц в момент t около точки шестимерного фазового пространства $(\vec{r}, \vec{\omega}, V)$ в малом объеме $\Delta\vec{r} \subset R^3$ трехмерного конфигурационного пространства за малый промежуток времени Δt [1–6]. Левая часть уравнения (1) отражает убыль частиц за счет свободного движения и столкновений (поглощения и рассеяния) с веществом среды, правая часть — прибыль за счет столкновений и за счет источников, работа которых определена независимо от решения уравнения. Часто это уравнение называется линейным уравнением Больцмана, поскольку в кинетической теории жидкостей и газов оно может быть получено из уравнения Больцмана для бинарной смеси в предположении, что "один из компонентов имеет очень малую плотность, так что столкновениями

¹ $(\vec{r}, \vec{V}) = (\vec{r}, \vec{\omega}, V)$ является обычным набором фазовых координат для нейтронов. Для фотонов, скорость которых постоянна и равна скорости света, естественным является набор $(\vec{r}, \vec{\omega}, E)$, где E — энергия частицы. Соответственно интегрирование по V заменяется интегрированием по E .

его частиц между собой можно пренебрегать по сравнению со столкновениями с частицами другого компонента" [16].

Переход к линейному уравнению, существенно более простому по сравнению с уравнением Больцмана для теории газов, возможен, если судьба одной частицы никак не влияет на судьбу другой. Такая независимость судеб обеспечивается предположениями 5 и 6. Предположение 6 о пренебрежимо малом вкладе в физику явления взаимных столкновений частиц хорошо согласуется с разреженностью потока частиц в практических задачах. Предположение 5 означает, что уравнение баланса частиц (1) не отражает баланса энергии при столкновениях частицы с веществом среды и не учитывает динамику среды.

Отметим простое, но важное обстоятельство. Линейность уравнения (1) позволяет его нормировать так, чтобы независимый источник был нормирован на одну частицу: $\int n_0(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V) dt d\vec{r} d\vec{\omega} dV = 1$. После такой нормировки это уравнение можно рассматривать как уравнение для вероятностного процесса блуждания одной частицы. Предположение 2 означает, что процесс блуждания отдельной частицы является марковским процессом [17].

В вероятностной теории марковская, или цепная, зависимость является естественным обобщением понятия независимости. Марковское свойство процесса характеризуется отсутствием последействия или отсутствием памяти (lack of memory) и означает, что любая информация о прошлом процесса не меняет условной вероятности событий, относящихся к будущему. В эволюционной кинетической теории это соответствует предположению, что в каждый момент времени блуждание частицы полностью определяется условиями в этот момент, без учета предыстории. Выполнение марковского свойства существенно зависит от выбора фазового пространства. Удачный выбор фазового пространства может превратить случайный процесс в марковский. Так, движение частицы, находящейся в точке \vec{r} , зависит от скорости \vec{V} , которая определяется предысторией. При введении скорости в набор фазовых координат формально убирается эта зависимость от прошлого и рассматриваемый процесс превращается в марковский. В статье свойство марковости используется практически лишь для того, чтобы вероятность сложного события можно было представить произведением вероятностей последовательно происходящих составляющих событий.

Перечисленные предположения позволяют получить другое линейное уравнение — интегральное уравнение типа уравнения Пайерлса [13] для плотности числа столкновений частиц. В наиболее общей форме это уравнение имеет вид интегрального уравнения Фредгольма второго рода:

$$p(x) = p_1(x) + \int_X p(x') p(x' \rightarrow x) dx'. \quad (2)$$

Для интерпретации этого уравнения как уравнения для плотности столкновений частиц необходимо придать физический смысл переменным, наложив на них некоторые ограничения:

$X = \{x\}$ — фазовое пространство состояний частиц (как правило, $X = R^n$);

dx — мера Лебега в пространстве состояний X ;

$p_1(x)$ — плотность первых (после рождения в источнике) столкновений частиц в точке x (в состоянии x), $p_1(x) \geq 0$;

$p(x)$ — плотность всех (первых, вторых и т. д.) столкновений в точке x , $p(x) \geq 0$;

$p(x' \rightarrow x)$ — плотность вероятности перехода частицы из состояния x' в состояние x без промежуточных столкновений за шаг; $p(x' \rightarrow x) \geq 0$; $\int_X p(x' \rightarrow x) dx = 1 - p_c(x') \leq 1$. Функция

$p_c(x') = 1 - \int_X p(x' \rightarrow x) dx \geq 0$ называется вероятностью поглощения (capture) в точке x' . В отличие от уравнения (2) в этом определении поглощения интегрирование ведется по второму аргументу переходной вероятности².

²Неравенство $\int_X p(x' \rightarrow x) dx \leq 1$ справедливо в отсутствие размножений частиц в акте столкновения. Стрелка в записи $(x' \rightarrow x)$ двух аргументов функции $p(x' \rightarrow x)$ по сравнению с записью $p(x', x)$ наглядно передает физический смысл этих аргументов (естественная упорядоченность точек двух последовательных столкновений). Заметим, что для физических терминов (фазовое пространство, частица, столкновение, макроскопическое сечение) здесь и далее используется формальное математическое определение понятия. Это соответствует цели заниматься математической моделью, не претендуя на углубление в физику явлений.

Другие дополнительные предположения и определения, в частности связь между плотностью частиц $n(t, \vec{r}, \vec{\omega}, V)$ и плотностью столкновений частиц $p(x)$, будут вводиться по мере необходимости при проведении преобразований уравнений.

Если записать уравнение (2) в операторной форме

$$p = p_1 + Kp, \quad (3)$$

где K — линейный интегральный оператор, действующий в некотором банаховом пространстве L интегрируемых по Лебегу функций $p(x)$: $K \in \{L \rightarrow L\}$, $L = \{p(x)\}$, то решение уравнения (3) можно формально представить разложением в ряд Неймана: $p = (1 - K)^{-1}p_1 = p_1 + Kp_1 + K^2p_1 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} K^n p_1$. Здесь $[K^n p_1](x) = \int \dots \int_X p_1(x_1)p(x_1 \rightarrow x_2) \dots p(x_n \rightarrow x) dx_1 \dots dx_n$, ($n \geq 1$); $[K^0 p_1](x) = p_1(x)$. В теории переноса обычно полагают $L = L_1$ с нормой $\|p(x)\| = \int_X |p(x)| dx$. Предполагают, что для $\|K\| \leq \sup_x \int_X |p(x' \rightarrow x)| dx'$ выполнены условия сходимости ряда. Легко показать, что для сходимости ряда достаточно выполнение условия $\|K^m\| < 1$, где m — некоторое натуральное число [9, 17]. В прикладных задачах сходимость ряда Неймана и, следовательно, существование решения уравнения (2) обеспечиваются наличием поглощения, конечностью размеров системы и т. п. Формально решение уравнения (3) можно получить методом последовательных приближений, начиная с некоторого $P^{(0)}$: $P^{(N+1)} = p_1 + KP^{(N)}$. Эти итерации эквивалентны оценке решения по первым N членам ряда Неймана: $p_1 + KP^{(N)} = (I + K + K^2 + \dots + K^N)p_1 + K^{N+1}(P^{(0)})$. Если при $N \rightarrow \infty$ выполнены условия сходимости, то погрешность определяется формулой $P^{(N)} - p = K^N(P^{(0)} - p)$ [18]. При нормировке источника на 1 и отсутствии размножения члены ряда Неймана имеют прозрачный физический и вероятностный смысл: n -й член ряда — это рассчитанная на одну среднюю частицу источника плотность вероятности n -го (после рождения в источнике) столкновения в точке x :

$$p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} p_n(x) = p_1(x) + p_2(x) + \dots + p_n(x) + \dots$$

2. Полное макроскопическое сечение. Плотность распределения длины свободного пробега частицы. Оптическое расстояние между точками

Для перехода от уравнения (2) к уравнению (1) необходимо конкретизировать вид ядра интегрального оператора уравнения (2), определив пространство состояний частицы и вероятностный механизм перескоков частицы из одного состояния в другое в согласии с основными предположениями линейной теории переноса, перечисленными в разд. 1.

Сначала рассмотрим стационарную задачу, в которой в уравнении (1) плотность частиц не зависит от времени. Состояние частицы x — набор координат фазового пространства $X = R^3 \times R^3$ — будем обозначать (\vec{r}, \vec{V}) либо $(\vec{r}, \vec{\omega}, V)$, где \vec{r} — радиус-вектор положения частицы в пространстве R^3 ; \vec{V} — вектор скорости; $\vec{\omega}$ — единичный вектор направления полета; V — модуль скорости. Интегрирование по всему фазовому пространству $X = R^3 \times R^3$ будем обозначать двумя знаками интеграла подряд, а интегрирование по R^3 или по R^1 — одним знаком интеграла.

Предположим, что ядро $p(x' \rightarrow x)$ интегрального уравнения (2) — плотность вероятности перехода частицы из состояния x' в состояние x — представимо суперпозицией двух функций: $p(x' \rightarrow x) = [T \circ C](x') = T(C(x'))$. Здесь столкновительная функция C меняет параметры состояния частицы в акте столкновения, а транспортная функция T меняет параметры состояния в результате прямолинейного движения частицы после столкновения [7]. Вероятностный смысл этих функций: C — условная плотность распределения новых параметров $(\vec{\omega}, V)$ при условии столкновения в точке $x' = (\vec{r}', \vec{\omega}', V')$; T — условная плотность распределения очередной пространственной точки столкновения \vec{r} при условии, что после столкновения в точке \vec{r}' частица летит в направлении $\vec{\omega}$ с постоянной

скоростью V . Опираясь на марковское свойство независимости прошлого и будущего, $p(x' \rightarrow x)$ можно записать в виде произведения этих плотностей:

$$p(x' \rightarrow x) = T(C(x')) = C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r}') T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}). \quad (4)$$

Термин *суперпозиция* подчеркивает некоммутативность умножения функций C и T , переводящих x' в x . Заметим, что запись правой части соотношения (4) означает, что первой на x' действует функция C .

Физически реальный смысл уравнение переноса приобретает, когда функции T и C определяются эффективными макроскопическими сечениями взаимодействия частиц со средой — полным и дифференциальным. Обратим внимание на то, что для вывода уравнения (1) из уравнения (2) явный вид дифференциального сечения, т. е. функции C , не существует. Достаточно чтобы функция C удовлетворяла требованиям ограниченности, дифференцируемости и т. п., необходимым для математической корректности преобразований, связанных с этим выводом.

Явный вид функции T , имеющей смысл плотности распределения длины свободного пробега частицы, вытекает из следующего вероятностного определения полного макроскопического сечения $\Sigma(\vec{r}, V)$ для изотропной среды, т. е. в предположении, что $\Sigma(\vec{r}, V)$ не зависит от направления полета $\vec{\omega}$.

Определение. Вероятность того, что частица, долетевшая без столкновений до точки \vec{r} со скоростью \vec{V} , испытает столкновение в малом интервале $(\vec{r}, \vec{r} + \vec{V}\Delta t)$, равна $\Sigma(\vec{r}, V)\Delta s + o(\Delta s)$, где расстояние $\Delta s = V\Delta t$.

Обозначим через ξ случайную длину свободного пробега частицы от точки \vec{r}' до точки \vec{r} в направлении $\vec{\omega}$ (рис. 1).

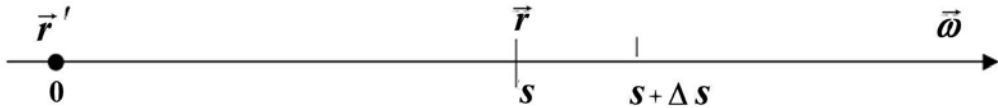


Рис. 1. Свободный пробег частицы от точки \vec{r}' в направлении $\vec{\omega}$

Из приведенного выше определения полного сечения $\Sigma(\vec{r}, V)$ получаем уравнение для функции распределения $F_\xi(s) = P\{\xi \leq s\} = F(s)$ случайной величины ξ при $s \geq 0$:

$$P\{\xi \in (s, s + \Delta s)\} \equiv F(s + \Delta s) - F(s) = (1 - F(s))(\Sigma(s)\Delta s + o(\Delta s)).$$

В правой части последнего равенства первый множитель $1 - F(s) = P\{\xi > s\}$ есть вероятность пролететь без столкновения расстояние s от точки \vec{r}' , второй множитель — вероятность столкнуться в интервале $(s, s + \Delta s)$. В этом представлении вероятности сложного события в виде произведения вероятностей опять использовано марковское свойство условной независимости прошлого и будущего при фиксированном настоящем. Разделив обе части последнего равенства на Δs и перейдя к пределу при $\Delta s \rightarrow 0$, получим обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{dF}{ds} = (1 - F(s)) \Sigma(s)$$

с начальным условием $F(0) = 0$. Решение этого уравнения $F(s) = 1 - \exp\left(-\int_0^s \Sigma(l)dl\right)$. Отсюда плотность распределения случайной длины свободного пробега

$$p_\xi(s) = \begin{cases} \frac{dF}{ds} = \Sigma(s) \exp\left(-\int_0^s \Sigma(l)dl\right) & \text{при } s \geq 0; \\ 0 & \text{при } s < 0. \end{cases} \quad (5)$$

Такое распределение пробега (5) означает, что в форме интегрирования вдоль луча от фиксированной точки \vec{r} до точки \vec{r}' (в направлении, противоположном направлению $\vec{\omega}$) функция $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{\omega}, V)$ имеет следующий вид:

$$T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{\omega}, V) = \Sigma(\vec{r}, V) \exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right), \quad (6)$$

где $\vec{r} = \vec{r}' + \vec{\omega}s$, $s = |\vec{r}' - \vec{r}|$.

Величина $\tau(\vec{r}', \vec{r}) = \int_0^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}) dl$, где $s = |\vec{r}' - \vec{r}|$, $\vec{\omega} = \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$, называется *оптическим расстоянием* между точками \vec{r}' и \vec{r} . Если вдоль направления $\vec{\omega}$ между точками \vec{r}' и \vec{r} полное сечение не меняется, т. е. $\Sigma(s) = \text{const} = \Sigma$ (случай однородной среды), оптическое расстояние $\tau(\vec{r}', \vec{r}) = \Sigma|\vec{r}' - \vec{r}|$.

В однородной среде ($\Sigma = \text{const}$) формулы для функции распределения и плотности распределения длины свободного пробега приобретают простой вид: $F_\xi(s) = 1 - e^{-\Sigma s}$; $p_\xi(s) = \Sigma e^{-\Sigma s}$. В случае бесконечной однородной среды несложные вычисления позволяют получить следующее известное соотношение между математическим ожиданием длины l свободного пробега в направлении $\vec{\omega}$ и полным макроскопическим сечением Σ :

$$l = E\xi = \int_{-\infty}^{\infty} s p_\xi(s) ds = \int_0^{\infty} s \Sigma e^{-\Sigma s} ds = \frac{1}{\Sigma}.$$

3. Переход от интегрирования по объему к интегрированию вдоль луча.

Интегральное уравнение переноса в форме интегрирования вдоль луча

Определение функции T как плотности распределения длины свободного пробега позволяет следующим образом выразить плотность распределения первых столкновений $p_1(\vec{r}, \vec{V})$ через плотность частиц независимого источника $n_0(\vec{r}, \vec{V})$:

$$p_1(\vec{r}, \vec{V}) = \int n_0(\vec{r}', \vec{V}') T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}') d\vec{r}' \quad (7)$$

Подставив $p_1(\vec{r}, \vec{V})$ из (7) и $p(x' \rightarrow x)$ из (4) в уравнение (2), получим:

$$p(\vec{r}, \vec{V}) = \int n_0(\vec{r}', \vec{V}') T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}') d\vec{r}' + \int \int p(\vec{r}', \vec{V}') C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r}') T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}') d\vec{V}' d\vec{r}'. \quad (8)$$

Когда система определена в ограниченной области пространства R^3 , *естественные* граничные условия — внешний поток частиц с поверхности внутрь системы — можно рассматривать в качестве источников. Для существования T на любом отрезке (\vec{r}', \vec{r}) требуется выпуклость множества точек \vec{r} , образующих ограниченную систему. Для решения задач методом Монте-Карло обычно не представляет трудностей "аккуратная" трактовка условий на границах невыпуклой системы. Например, можно невыпуклую систему окружить сферой с большим радиусом \vec{R} , область между внутренней границей этой сферы и границей системы считать вакуумом, а область вне этой сферы трактовать как поглощающую: $p_c(\vec{r}, \vec{V}) = 1$ при $\vec{r} \geq \vec{R}$. В работах [10–12] проблема невыпуклости изящно решается методом коэффициентов видимости.

Важную роль в выводе уравнения (1) из уравнения (8) играет форма интегрального уравнения, в которой интегрирование по объему конфигурационного пространства заменено интегрированием

вдоль луча. Возможность перехода к такой форме уравнения следует из определения функции T , которая в уравнении (8) описывает прямолинейное движение между двумя последовательными столкновениями в точках \vec{r}' и \vec{r} . При записи уравнения в форме (8) связь между направлением прямолинейного движения $\vec{\omega} = \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$ и вектором $\vec{r} - \vec{r}'$ выражается в том, что функция T в подынтегральном выражении содержит δ -функцию $\delta\left(\vec{\omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right)$, из-за которой уравнение (8) называется интегральным уравнением переноса с обобщенным ядром [9].

Переход от уравнения (8) с интегрированием по объему к уравнению с интегрированием вдоль луча (и обратный переход) основан на справедливости следующего интегрального равенства [6]:

$$\int_{W \in R^3} f(\vec{r}', \vec{r}, \vec{\omega}) \delta\left(\vec{\omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right) \frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} d\vec{r}' = \int_0^{l_0} f((\vec{r} - l\vec{\omega}), \vec{r}, \vec{\omega}) dl. \quad (9)$$

Обратим внимание на смысл обозначений в равенстве (9). Здесь $f(\vec{r}', \vec{r}, \vec{\omega})$ рассматривается как интегрируемая по переменной \vec{r}' функция при фиксированных значениях \vec{r} и $\vec{\omega}$. При фиксированных \vec{r} и $\vec{\omega}$ δ -функция связывает переменную точку \vec{r}' объема W с переменной интегрирования l луча: $\vec{r}' = \vec{r} - l\vec{\omega}$. Верхний предел интегрирования по переменной l , обозначенный в правой части равенства (9) как l_0 (l_0 может быть равен ∞), равен расстоянию от фиксированной точки \vec{r}' пространства R^3 до точки пересечения луча $\vec{r} - l\vec{\omega}$ с внешней границей ограниченной области интегрирования W . Расстояние $l \geq 0$ измеряется в направлении, противоположном фиксированному направлению $\vec{\omega}$. Наличие δ -функции означает, что вклад в интеграл в левой части равенства при интегрировании по всей области W пространства R^3 дают лишь точки луча $\vec{r} - l\vec{\omega}$.

Формальное доказательство равенства (9) следует из определения δ -функции на вероятностном пространстве направлений Ω ($\int_{\Omega} f d\vec{\omega} = 1$) как меры Дирака $\delta(\vec{\omega}_0) d\vec{\omega}$, сосредоточенной в точке $\vec{\omega}_0$ так,

$$\int_B \delta(\vec{\omega}_0) d\vec{\omega} = \begin{cases} 1, & \text{если } \vec{\omega}_0 \in B; \\ 0, & \text{если } \vec{\omega}_0 \notin B \end{cases} \quad \text{для любой измеримой области } B \subseteq \Omega \text{ [19].}$$

Для вещественной прямой R^1 это соответствует определению δ -функции в качестве линейного функционала на пространстве функций $f(x)$ такого, что $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0)$.

Для доказательства перейдем от координат с центром $\vec{r} = 0$ к сферической системе координат (l, ψ, θ) с центром в фиксированной точке \vec{r} [6]. В этой вспомогательной системе \vec{l} — радиус-вектор точки \vec{r}' , $l = |\vec{r} - \vec{r}'|$; $d\vec{r}' = dl \cdot l \cdot d\theta \cdot l \cdot \sin\theta \cdot d\psi$ — элемент объема около \vec{r}' . Углы — полярный θ и азимутальный ψ , $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \psi \leq 2\pi$ — определяют направление $\vec{\omega}' = \frac{\vec{l}}{l} = \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{l}$ от фиксированной точки \vec{r} к точке \vec{r}' . Отсюда в координатах $(l, \vec{\omega}')$ $\vec{r}'(l, \vec{\omega}') = \vec{r} - l\vec{\omega}'$, и при нормировке меры $d\vec{\omega}'$ телесного угла на 1 $\left(\int_{\Omega} d\vec{\omega}' = 1\right)$ получим $d\vec{r}' = dl \cdot 4\pi \cdot l^2 \cdot d\vec{\omega}'$. По теореме Фубини левая часть равенства (9) превращается в повторный интеграл по l и $\vec{\omega}'$ от функции $f((\vec{r} - l\vec{\omega}'), \vec{r}, \vec{\omega})$. После интегрирования по $\vec{\omega}'$ с подстановкой по определению δ -функции $\vec{\omega}' = \vec{\omega}$ и очевидных сокращений этот интеграл равен интегралу по l в правой части (9).

На основании равенства (9) в дальнейших преобразованиях применяются две эквивалентные формы записи соотношений. Интегрирование по объему с короткой записью $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V})$ неявно подразумевает зависимость функции T от полного сечения $\Sigma(\vec{r}, V)$, наличие в подынтегральном выражении множителя $\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2}$ и δ -функции $\delta\left(\vec{\omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right)$. Длинная запись T в виде (6) с явно выраженной зависимостью от полного сечения (но без этого множителя и δ -функции) используется при переходе к интегрированию вдоль луча согласно (9).

Введем плотность потока частиц $\varphi(\vec{r}, \vec{V})$, связанную с плотностью частиц $n(\vec{r}, \vec{V})$ и плотностью столкновений $p(\vec{r}, \vec{V})$ формулами

$$\varphi(\vec{r}, \vec{V}) = Vn(\vec{r}, \vec{V}); \quad (10)$$

$$p(\vec{r}, \vec{V}) = \Sigma(\vec{r}, V)\varphi(\vec{r}, \vec{V}) = \Sigma(\vec{r}, V)Vn(\vec{r}, \vec{V}). \quad (11)$$

Введем плотность эмиссии частиц:

$$\chi(\vec{r}, \vec{V}) = n_0(\vec{r}, \vec{V}) + \int p(\vec{r}, \vec{V}') C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r}) d\vec{V}'. \quad (12)$$

Пользуясь определением (12), уравнение (8) можно записать в виде

$$p(\vec{r}, \vec{V}) = \int \chi(\vec{r}', \vec{V}) T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}) d\vec{r}'. \quad (13)$$

Пользуясь по определению (11) связью плотности столкновений с плотностью потока $p(\vec{r}, \vec{V}) = \Sigma(\vec{r}, V)\varphi(\vec{r}, \vec{V})$ и подставляя в соответствии с равенством (9) в уравнение (13) вид функции $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}) = \Sigma(\vec{r}, V) \exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right)$ в форме (6) интегрирования вдоль луча, получаем уравнение

$$\varphi(\vec{r}, \vec{V}) = \int_0^{l_0} \chi(\vec{r} - s\vec{\omega}, \vec{V}) \exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right) ds. \quad (14)$$

Уравнения (13), (14) имеют прозрачный физический смысл. Обсуждению геометрического смысла линейных уравнений переноса посвящен разд. 6.

Уравнения (13), (14) являются стационарными уравнениями³. Для получения нестационарных уравнений требуется кроме зависимости функций n, φ, χ от времени ввести в подынтегральное выражение уравнений (13), (14) δ -функцию $\delta\left(t' - \left(t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{V}\right)\right)$, которая при интегрировании по пространству и времени учитывает связь расстояния между точками \vec{r}' и \vec{r} со временем пролета частицей этого расстояния (время запаздывания):

$$p(t, \vec{r}, \vec{V}) = \int_{-\infty}^t \int \chi(t', \vec{r}', \vec{V}) T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}) \delta\left(t' - \left(t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{V}\right)\right) d\vec{r}' dt'. \quad (15)$$

Переходя к форме интегрирования вдоль луча и пользуясь по определению (11) связью $p(\vec{r}, \vec{V}) = \Sigma(\vec{r}, V)\varphi(\vec{r}, \vec{V})$, получаем нестационарное уравнение

$$\varphi\left(t, \vec{r}, \vec{V}\right) = \int_0^{l_0} \chi\left(t - \frac{s}{V}, \vec{r} - s\vec{\omega}, \vec{V}\right) \exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right) ds. \quad (16)$$

³Впервые в приближении изотропного источника и изотропности рассеяния интегральное уравнение вида (14) было получено в 1939 г. Рудольфом Пайерлсом для описания диффузии моноэнергетических нейтронов [13].

4. Вывод линейного интегродифференциального кинетического уравнения Больцмана из интегрального транспортного уравнения

В этом разделе дается достаточно прозрачный вывод интегродифференциального уравнения переноса из интегрального. Доказательство стартует от уравнения (14) и существенно использует *лучевую* форму записи этого интегрального уравнения. В (14) не трудно узнать уравнение, которое получается в процессе традиционного вывода интегрального уравнения из интегродифференциального. Например, это интегральное соотношение приведено под номером (1.27) на странице 22 одной из лучших книг по теории переноса нейтронов — книге Д. Белла и С. Глестона "Теория ядерных реакторов" [5].

Как написать интегральное уравнение (14) для фиксированного состояния, близкого к (\vec{r}, \vec{V}) ? Предположим, что (\vec{r}, \vec{V}) является внутренней точкой замкнутого множества состояний, для которых справедливо уравнение (14). Тогда можно выбрать h настолько малым, что точка (\vec{r}_1, \vec{V}) , где $\vec{r}_1 = \vec{r} - h\vec{\omega}$, принадлежит этому множеству состояний. Заметив, что точка \vec{r}_1 находится на луче $\vec{r} - s\vec{\omega}$, перейдем к записи уравнения (14) для фиксированного состояния (\vec{r}_1, \vec{V}) с интегрированием вдоль этого луча, приняв по-прежнему в качестве переменных интегрирования s и l , отсчитываемых от точки \vec{r} : $l_0 \geq s \geq l \geq h \geq 0$. Обратив внимание на изменившиеся пределы интегрирования при такой подстановке переменных в уравнение (14) для (\vec{r}_1, \vec{V}) , получим уравнение

$$\varphi(\vec{r} - h\vec{\omega}, \vec{V}) = \int_h^{l_0} \chi(\vec{r} - s\vec{\omega}, \vec{V}) \exp\left(-\int_h^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right) ds. \quad (17)$$

Рассматривая h в качестве непрерывного параметра, из уравнения (17) дифференцированием по h можно получить интегродифференциальное кинетическое уравнение (1), смысл которого состоит в описании локального изменения плотности частиц (или плотности потока). В предположении локальной дифференцируемости этой плотности продифференцируем по h обе части равенства (17). Найдя значения производных при $h = 0$, тем самым найдем производную функции $\varphi(\vec{r}, \vec{V})$ в точке \vec{r} по направлению $\vec{\omega}$:

$$\frac{d\varphi(\vec{r}(h))}{dh} = \frac{d\varphi(\vec{r} - h\vec{\omega})}{d\vec{r}} \frac{d(\vec{r} - h\vec{\omega})}{dh}; \quad \left. \frac{d\varphi}{dh} \right|_{h=0} = -\vec{\omega} \nabla \varphi(\vec{r}, \vec{V}).$$

Обозначим через $f(s, h)$ подынтегральную функцию в правой части равенства (17):

$$f(s, h) = \chi(\vec{r} - s\vec{\omega}, \vec{V}) \exp\left(-\int_h^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right)$$

и для $I(h) = \int_h^{l_0} f(s, h) ds$ воспользуемся известной формулой $\frac{dI}{dh} = \int_h^{l_0} f'_h(s, h) ds - f(h, h) \frac{dh}{dh}$ дифференцирования по параметру определенного интеграла, у которого подынтегральная функция и пределы интегрирования зависят от этого параметра:

$$f(h, h) = \chi(\vec{r} - h\vec{\omega}, \vec{V}) \exp\left(-\int_h^h \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right) = \chi(\vec{r} - h\vec{\omega}, \vec{V});$$

$$f'_h(s, h) = \chi(\vec{r} - s\vec{\omega}, \vec{V}) \exp\left(-\int_h^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right) \frac{d}{dh} \left(-\int_h^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right);$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh} \int_h^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl &= -\Sigma(\vec{r} - h\vec{\omega}, V); \\ \int_h^{l_0} f'_h(s, h) ds &= \Sigma(\vec{r} - h\vec{\omega}, V) \int_h^{l_0} \chi(\vec{r} - s\vec{\omega}, \vec{V}) \exp\left(-\int_h^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right) ds = \\ &= \Sigma(\vec{r} - h\vec{\omega}, V) \varphi(\vec{r} - h\vec{\omega}, \vec{V}) \end{aligned}$$

(переход к последнему равенству следует из уравнения (17)).

При $h = 0$ полученные выражения приводят к уравнению, связывающему изменение плотности потока частиц в точке (\vec{r}, \vec{V}) с плотностью эмиссии в этой же точке:

$$\vec{\omega} \nabla \varphi(\vec{r}, \vec{V}) + \Sigma(\vec{r}, V) \varphi(\vec{r}, \vec{V}) = \chi(\vec{r}, \vec{V}). \quad (18)$$

Подставив в уравнение (18) выражение $\chi(\vec{r}, \vec{V})$ из определения (12), получим стационарное уравнение для плотности потока частиц:

$$\vec{\omega} \nabla \varphi(\vec{r}, \vec{V}) + \Sigma(\vec{r}, V) \varphi(\vec{r}, \vec{V}) = \int \Sigma(\vec{r}, V') \varphi(\vec{r}, \vec{V}') C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r}) d\vec{V}' + n_0(\vec{r}, \vec{V}), \quad (19)$$

которое, пользуясь определением (10), можно записать для плотности частиц:

$$\vec{V} \nabla n(\vec{r}, \vec{V}) + V \Sigma(\vec{r}, V) n(\vec{r}, \vec{V}) = \int V' \Sigma(\vec{r}, V') n(\vec{r}, \vec{V}') C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r}) d\vec{V}' + n_0(\vec{r}, \vec{V}). \quad (20)$$

Для вывода нестационарного уравнения (1) достаточно рассмотреть уравнение

$$\varphi\left(t - \frac{h}{V}, \vec{r} - h\vec{\omega}, \vec{V}\right) = \int_h^{l_0} \chi\left(t - \frac{s}{V}, \vec{r} - s\vec{\omega}, \vec{V}\right) \exp\left(-\int_h^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}, V) dl\right) ds, \quad (21)$$

которое с помощью параметра h получается из уравнения (16) точно так же, как уравнение (17) получается из (14).

Дифференцируя левую часть уравнения (21) по h ,

$$\frac{d\varphi}{dh} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} \left(t - \frac{h}{V}\right) \frac{\partial}{\partial h} \left(t - \frac{h}{V}\right) + \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial h} = -\frac{\partial \varphi}{\partial t} \frac{1}{V} + \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial h},$$

получаем нестационарное интегродифференциальное уравнение (1) с недостающей в уравнениях (19), (20) производной по времени. Заметим, что дифференцирование правой части уравнения (21), как и переход от уравнений (13), (14) к нестационарным уравнениям (15), (16), предполагает отсутствие зависимости функций $C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r})$ и $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V})$ от времени. Независимость от времени функций C и T в линейных задачах переноса соответствует предположению 5 (см. разд. 1) о стационарности среды, в которой происходит перенос частиц. Имея в виду стационарность среды, уравнения (1), (15), (16) нередко называют квазистационарными, поскольку вывод этих уравнений предполагает, что искомые функции (плотность, поток частиц) зависят от времени, но среда, в которой происходит блуждание частиц, остается стационарной и переходная вероятность инвариантна относительно сдвигов по времени.

5. Интегральное уравнение для плотности эмиссии частиц

Уравнение для плотности эмиссии частиц можно получить, если подставить в определение (12) выражение для плотности столкновений из уравнения (13):

$$\chi(\vec{r}, \vec{V}) = n_0(\vec{r}, \vec{V}) + \int \left(\int \chi(\vec{r}', \vec{V}') T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | \vec{V}') d\vec{r}' \right) C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r}) d\vec{V}'. \quad (22)$$

В этом интегральном уравнении по сравнению с уравнением (8) для плотности столкновений источник входит явно, а не в виде первых столкновений. Поменялся по сравнению с уравнением (8) физический смысл координат (\vec{r}, \vec{V}) . В уравнениях (8), (13)–(16) они были состоянием частицы перед столкновением, а в уравнении (22) эти координаты описывают состояние частицы после столкновения (или в результате рождения в источнике). Эти изменения связаны с тем, что в подынтегральном выражении поменялись местами функции C и T . При попытке перехода к интегрированию вдоль луча эти изменения приводят уравнение (22) к следующему виду:

$$\chi(\vec{r}, \vec{V}) = \int_{R^3} I(\vec{\omega}', V') C(\vec{V}' \rightarrow \vec{V} | \vec{r}) d\vec{\omega}' dV' + n_0(\vec{r}, \vec{V}), \quad (23)$$

где $I(\vec{\omega}', V') = \int_0^{l_0(\vec{\omega}')} \chi(\vec{r} - s\vec{\omega}', \vec{V}') \exp\left(-\int_0^s \Sigma(\vec{r} - l\vec{\omega}', V') dl\right) ds$.

Уравнение (23) ясно выражает физический смысл того, что эмиссия в точке (\vec{r}, \vec{V}) зависит от всего пространства направлений и не может быть выражена в виде лучевой зависимости лишь по одному направлению. Этим обстоятельством можно объяснить сложности, возникшие у авторов работ [10–12] при попытке с помощью лучевой трактовки исследовать вопрос об эквивалентности так называемого *дополнительного* интегрального уравнения и интегродифференциального уравнения Больцмана (1). Дополнительное уравнение было предложено в этих работах для задач переноса лучистой энергии. На некотором этапе исследований авторы даже выражали сомнение в эквивалентности интегродифференциального уравнения Больцмана (1) и дополнительного уравнения [11, стр. 37]. В книге [12] нет сомнений в эквивалентности дополнительного интегрального уравнения и интегродифференциального уравнения. Однако нет и каких-либо преобразований дополнительного интегрального уравнения к виду интегрального уравнения, который был бы явно эквивалентен линейному интегродифференциальному уравнению Больцмана. Из уравнения (23) и комментария к смыслу приводимых в работах [10–12] формул метода коэффициентов ослабления с акцентированием внимания читателя на *фиксированном точечном источнике, пучке расходящихся лучей, времени запаздывания* и т. п. видно, что в работах [10–12] реализована явная схема решения квазистационарного уравнения для эмиссии частиц.

6. Заключительные замечания о геометрическом смысле интегрального и интегродифференциального уравнений переноса и о численном решении задачи переноса

Физический смысл различных конкретных форм уравнения переноса (1), (14), (23) можно с некоторой долей наглядности (*геометрически*) изобразить на плоскости. На рис. 2 жирная точка с исходящей из нее пунктирной жирной стрелкой символизируют точку (\vec{r}, \vec{V}) шестимерного фазового пространства состояний. Короткие стрелки разной длины изображают, как частицы формируют вклад в искомое решение в точке (\vec{r}, \vec{V}) . Концентрические пунктирные окружности с уменьшающимся радиусом соответствуют ε -окрестностям состояний процесса при дифференцировании — в

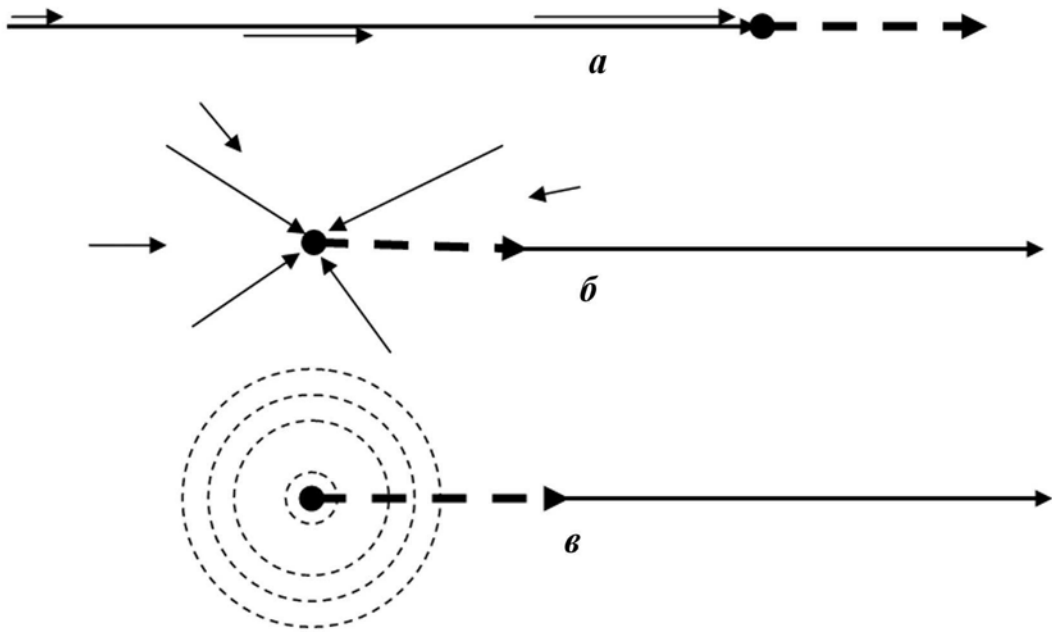


Рис. 2. Графическая иллюстрация смысла различных форм уравнения переноса: *a* — интегральное уравнение для плотности потока частиц; *б* — интегральное уравнение для плотности эмиссии частиц; *в* — интегро-дифференциальное уравнение для плотности частиц

процессе $\varepsilon \rightarrow 0$. Длинная стрелка, заканчивающаяся или начинающаяся в точке \vec{r} , символизирует полученное значение искомой функции $f(\vec{r}, \vec{V})$, относительно которой написано уравнение.

Рисунок 2, *a* призван показать физический смысл уравнения (14), связывающего поток частиц в точке (\vec{r}, \vec{V}) с эмиссией частиц в точках луча интегрирования, направленного из бесконечности в точку (\vec{r}, \vec{V}) . Ясно, что частицы, родившиеся в тех точках шестимерного пространства, которые не находятся на таком луче, пролетают мимо точки (\vec{r}, \vec{V}) . Следовательно, эти частицы не могут непосредственно внести вклад в поток в этой точке. Говоря иначе, плотность потока частиц в точке (\vec{r}, \vec{V}) определяется *прямым прострелом* в точку (\vec{r}, \vec{V}) из всех точек луча интегрирования $\vec{r} - s\vec{\omega}$. Внести свой вклад могут те и только те частицы, которые либо "родились" со скоростью \vec{V} в какой-либо точке источника, принадлежащей лучу интегрирования, либо претерпели столкновение в точке пересечения траектории полета с этим лучом и получили после столкновения скорость \vec{V} . Результат всех таких столкновений и работа независимого источника учтены в эмиссии. Вклад из далеких точек луча интегрирования экспоненциально падает с расстоянием, и решение в основном определяется эмиссией в близких к \vec{r} точках⁴. Суммарный вклад определяет плотность столкновений и в соответствии с определениями (10), (11) — плотность потока и плотность частиц в точке (\vec{r}, \vec{V}) . Искомая функция определена перед столкновением. Поэтому на рис. 2, *a* длинная стрелка упирается в точку (\vec{r}, \vec{V}) .

Рис. 2, *б* показывает, что эмиссия в точке (\vec{r}, \vec{V}) является результатом того, что частицы, добравшиеся со всех направлений в точку \vec{r} , испытали столкновение в этой точке и получили в результате

⁴В теории переноса излучения формулу $I_\nu = I_{\nu 0} \exp\left(-\int_0^s K_\nu dl\right)$, описывающую экспоненциальное уменьшение интенсивности (прямой прострел) монохроматического излучения вдоль некоторого направления, принято называть законом Бугера (или Бугера—Ламберта).

столкновения скорость \vec{V} . По сравнению с рис. 2, а поменялся физический смысл координат (\vec{r}, \vec{V}) . В уравнении (14) для плотности столкновений они были состоянием частицы перед столкновением, а в уравнении (23) для эмиссии координаты (\vec{r}, \vec{V}) — это состояние частицы после столкновения в точке \vec{r} (или в результате рождения в источнике).

Рис. 2, в символизирует, что баланс частиц в точке (\vec{r}, \vec{V}) полностью определяется скоростью процессов, происходящих непосредственно в этой точке. Для вычисления этой скорости достаточно знаний о поведении функции плотности частиц в бесконечно малой окрестности этой точки. В этой локальности — смысл перехода от интегрального уравнения (2) к интегродифференциальному (1). Здесь, как и в уравнении (23) для эмиссии, (\vec{r}, \vec{V}) — это состояние частицы после столкновения. Такое толкование координат (\vec{r}, \vec{V}) на рис. 2, б и 2, в отражается в том, что длинная стрелка исходит из точки (\vec{r}, \vec{V}) . Начало этой стрелки экранируется жирной пунктирной стрелкой.

Численное решение задачи переноса методом Монте-Карло сводится к последовательному моделированию событий *пробег* → *столкновение* → *пробег* ..., т. е. к циклическому вычислению функций T и C . Начинается цикл с моделирования стартовых координат траектории частицы в соответствии с функцией $n_0(\vec{r}, \vec{V})$. То есть формально, начиная с распределения независимого источника, решается уравнение (23) для эмиссии. Как отмечается в монографии [12], метод коэффициентов ослабления "по характеру вычислений имеет много общего с методом Монте-Карло". Фактически в том и другом методе моделированием обрывающегося с вероятностью 1 ряда Неймана для плотности величин фазовых состояний марковской цепи столкновений оцениваются функционалы от решения интегродифференциального уравнения Больцмана (1).

Список литературы

1. Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960.
2. Владимиров В. С. Математические задачи односкоростной теории переноса частиц // Труды МИАН. 1961. Т. 61. М.: Издательство АН СССР.
3. Теория ядерных реакторов / Под ред. Г. Биркгофа и Э. Вигнера. М.: Госатомиздат, 1963.
4. Кейз К., Цвайфель П. Линейная теория переноса. М.: Мир, 1972.
5. Белл Д., Глестон С. Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1974.
6. Кольчужкин А. М., Учайкин В. В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978.
7. Спанье Дж., Гелбард Э. Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1972.
8. Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А. и др. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука (Сибирское отделение), 1976.
9. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. Издание второе, дополненное. М.: Наука, 1982.
10. Дементьев Ю. А., Карповцев Е. А., Нарожная И. А. и др. Метод коэффициентов ослабления // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 2. С. 28—36.
11. Дементьев Ю. А., Карповцев Е. А., Морозова Е. В. и др. Дополнительное интегральное уравнение переноса излучения // Там же. 2001. Вып. 4. С. 35—41.
12. Дементьев Ю. А. Распределение лучистой энергии точечного источника. Новая форма интегрального уравнения переноса излучения. М.: Физматлит, 2005.

13. *Peierls R.* Critical conditions in the neutron multiplication // Proc. Cambridge Philos. Soc. 1939. Vol. 35. P. 610—615.
14. *Валландер С. В.* Уравнения и постановка задач в аэродинамике разреженных газов. Сборник I / Под ред. С. В. Валландера. Л.: Издательство ЛГУ, 1963. С. 7—37.
15. *Масленников М. В.* Аксиоматическая модель явлений переноса частиц. М.: Наука, 1989.
16. *Черчиньяни К.* Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978.
17. *Кочубей Ю. К.* Статистическое моделирование кинетических процессов. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2004.
18. *Кёртис Д.* Методы Монте-Карло для итерации линейных операторов: Пер. с англ. В. С. Владимирова // УМН. 1957. Т. 12. Вып. 5. С. 149—174.
19. *Миллер Б. М., Панков А. Р.* Теория случайных процессов в примерах и задачах / Под ред. А. И. Кибзуна. М.: Физматлит, 2007.

Статья поступила в редакцию 15.08.11.

УДК 519.6:536.71

ОБ ОДНОМ АЛГОРИТМЕ СКЛЕЙКИ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С P_1 -ПРИБЛИЖЕНИЕМ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

Н. Г. Карлыханов, Н. В. Селиванова
(РФЯЦ-ВНИИТФ), Томский ГУ

Исследуется алгоритм склейки кинетического уравнения с P_1 -приближением уравнения переноса. Проведено исследование области применимости P_1 -приближения уравнения переноса. Рассмотрена постановка внутренних граничных условий в точке склейки. Предложен критерий автоматического выбора точки склейки. Применимость предложенного алгоритма исследовалась на решении ряда методических задач.

Ключевые слова: перенос излучения, P_1 -приближение, склейка.

Введение

Для расчета ряда практических задач переноса излучения приходится решать кинетическое уравнение, расчет которого требует больших вычислительных ресурсов. Довольно часто встречаются случаи, когда рассчитываемая система состоит из чередующихся оптически прозрачных и оптически плотных областей. Рассчитывать такую систему в кинетической постановке нецелесообразно, а решение уравнения в P_1 -приближении может дать неудовлетворительный результат.

Весьма полезным оказывается подход, при котором в каждой области рассчитывается то уравнение, которое обеспечивает приемлемую точность при минимальных затратах машинных ресурсов. В процессе счета оптическая толщина может меняться в широком диапазоне как в пространстве, так и во времени, поэтому требуется разработка простого и надежного критерия применимости уравнения в P_1 -приближении. При организации таких вычислений необходимо провести склейку кинетического уравнения с уравнением в P_1 -приближении. Для этого нужно корректно поставить внутренние граничные условия.

Исследованию указанных проблем посвящена данная работа.

Постановка задачи

Для простоты изложения рассмотрим перенос излучения в плоском одномерном случае. Уравнение Больцмана в этом случае имеет вид

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \mu \frac{\partial I}{\partial x} + (\chi_a(x, t) + \chi_s(x, t)) I - \frac{\chi_s(x, t)}{2} \int_{-1}^1 I d\mu' = Q(x, t), \quad (1)$$

где c — скорость света; $I(x, t, \mu)$ — интенсивность излучения; x — пространственная координата; $\mu = \cos \varphi$ ($-1 < \mu < 1$) — косинус угла распространения излучения относительно оси x ; $\chi_a(x, t)$ — коэффициент поглощения излучения; $\chi_s(x, t)$ — коэффициент рассеяния излучения; $Q(x, t)$ — изотропный источник излучения. Уравнение (1) дополняется начальными и граничными условиями. Способ задания начальных условий для дальнейшего изложения не существен. Для постановки граничных условий применяются два способа.

Первый способ: на левой границе задается падающий поток в виде

$$I(\mu > 0) = f(\mu, t),$$

на правой границе — в виде

$$I(\mu < 0) = \varphi(\mu, t).$$

Здесь f и φ — известные положительные функции времени и угла.

Второй способ постановки граничных условий — *зеркальное отражение*. В этом случае распределение интенсивности излучения на границе подчиняется следующему закону:

$$I(\mu) = I(-\mu). \quad (2)$$

Граничное условие (2) можно задавать как на правой, так и на левой границе.

Уравнение переноса излучения в P_1 -приближении

Воспользуемся разложением функции интенсивности излучения в ряд относительно угловой переменной μ по полиномам Лежандра. Ограничившись первым членом разложения, ее можно представить в виде

$$I = 0,5(cU + 3\mu S). \quad (3)$$

Проинтегрируем уравнение (1) по угловой переменной с весом 1 и μ . В результате с учетом соотношения (3) получим следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} + \chi_a(x, t)cU = 2Q(x, t); \quad (4)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{3} \frac{\partial U}{\partial x} + (\chi_a(x, t) + \chi_s(x, t))c^{-1}S = 0. \quad (5)$$

Здесь введены обозначения

$$U = \frac{1}{c} \int_{-1}^1 I d\mu; \quad S = \int_{-1}^1 \mu I d\mu,$$

где U — плотность энергии излучения; S — поток излучения. Система уравнений (4), (5) называется системой уравнений переноса излучения в P_1 -приближении [1].

Граничные условия для уравнения переноса излучения в P_1 -приближении формулируются следующим образом. Поток на левой границе можно записать в виде

$$S = \int_0^1 \mu f(\mu, t) d\mu + \int_{-1}^0 \mu I d\mu. \quad (6)$$

Если в выражении (6) значение I заменить равенством (3), то граничные условия примут вид [2]

$$\alpha_{left}S + \beta_{left}U + \gamma_{left} = 0, \quad (7)$$

где

$$\alpha_{left} = 0,5; \quad \beta_{left} = 0,25c; \quad \gamma_{left} = \int_0^1 \mu f(\mu, t) d\mu.$$

Аналогичным образом падающий поток на правой границе представляется в виде

$$\alpha_{right}S + \beta_{right}U + \gamma_{right} = 0, \quad (8)$$

где

$$\alpha_{right} = 0,5; \quad \beta_{right} = -0,25 c; \quad \gamma_{right} = \int_{-1}^0 \mu \varphi(\mu, t) d\mu.$$

Выражение для полного потока на левой границе с учетом уравнения (2) примет вид (7) с коэффициентами

$$\alpha_{left} = 1; \quad \beta_{left} = 0; \quad \gamma_{left} = 0.$$

Аналогичным образом записываются коэффициенты на правой границе:

$$\alpha_{right} = 1; \quad \beta_{right} = 0; \quad \gamma_{right} = 0.$$

Разностная аппроксимация кинетического уравнения

Запишем кинетическое уравнение переноса в конечно-разностном виде [3]. Интенсивность излучения определим в центре ячейки и для ее обозначения будем использовать полуцелый нижний индекс. Интенсивности излучения на гранях ячеек соответствует целый нижний индекс. В этом случае на равномерной сетке по времени и пространству для уравнения (1) имеем разностную схему

$$\begin{aligned} & \frac{I_{i+1/2,j}^{n+1} - I_{i+1/2,j}^n}{\tau} + \frac{\mu_j}{h} \left(I_{i+1,j}^{n+1} - I_{i,j}^{n+1} \right) + (\chi_a + \chi_s)_{i+1/2}^{n+1} I_{i+1/2,j}^{n+1} - \\ & - \frac{(\chi_s)_{i+1/2}^{n+1}}{2} \sum_{j' \neq j} I_{i+1/2,j'}^{n+1} \Delta\mu_{j'} = Q_{i+1/2}^{n+1}, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad j = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь приняты следующие обозначения: n — номер шага по времени; $i + 1/2$ — номер ячейки; i — номер грани; j — номер направления по угловой переменной; τ — шаг по времени; h — шаг по пространству; N — количество граней ячеек; M — количество угловых направлений.

Отметим, что разностная аппроксимация (9) является консервативной, т. е. законы сохранения энергии тождественно выполняются на любой сетке по пространству, времени и угловой переменной.

Для замыкания системы уравнений (9) вводится дополнительное соотношение связи. В соответствии с TVD-методологией соотношение связи можно представить в следующем виде:

— для $\mu > 0$

$$I_{i+1}^{n+1} = I_{i+1/2}^{n+1} + 0,5\phi_{i+1/2}(\theta_{i+1/2}) \left(I_{i+1/2}^{n+1} - I_{i-1/2}^{n+1} \right); \quad (10)$$

— для $\mu < 0$

$$I_i^{n+1} = I_{i+1/2}^{n+1} - 0,5\phi_{i-1/2}(\theta_{i-1/2}) \left(I_{i+3/2}^{n+1} - I_{i+1/2}^{n+1} \right), \quad (11)$$

где $\theta_{i+1/2} = \frac{I_{i+3/2} - I_{i+1/2}}{I_{i+1/2} - I_{i-1/2}}$.

Отметим, что при значении $\phi(\theta) = 0$ соотношения связи (10), (11) дают первый порядок аппроксимации по пространству. В уравнениях (10), (11) индекс i меняется от 2 до $N - 1$. При $i = 1$ и $i = N$ функция $\phi(\theta) = 0$. Таким образом, в приграничных точках всегда реализуется схема первого порядка точности по пространству.

Функция $\phi(\theta)$ вычисляется по значениям интенсивностей излучения, взятым с предыдущего шага, как это было сделано в работах [3, 4]. При реализации расчета с применением ограничителя $\min \text{ mod}$ функция $\phi(\theta)$ примет вид [3]

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1 + \text{sign}(\theta_{i+1/2})}{2} \min \{1, |\theta_{i+1/2}|\}.$$

При использовании ограничителя $\min \text{mod}$ исходная система разностных уравнений имеет почти всюду второй порядок аппроксимации по пространству.

Падающий поток на левой границе запишем в разностном виде:

$$I_{1,j}^{n+1} = f(\mu_j, t), \quad j = \frac{M}{2} + 1, \dots, M;$$

на правой границе

$$I_{N,j}^{n+1} = \varphi(\mu_j, t), \quad j = 1, \dots, \frac{M}{2}.$$

Разностный вид уравнения (2) на левой границе:

$$I_{1,j}^{n+1} = I_{1,M-j+1}^{n+1}.$$

На правой границе аппроксимация производится аналогичным образом.

Разностная аппроксимация уравнений переноса излучения в P_1 -приближении

Запишем уравнение переноса излучения в P_1 -приближении в конечно-разностном виде; плотность энергии U определим в центре интервала и для ее обозначения будем использовать полуцелые пространственные индексы, поток энергии S отнесем к граням ячеек с сопоставлением целых индексов:

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1} - U_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_i^n}{h} + (\chi_a)_{i+1/2}^{n+1} c U_{i+1/2}^{n+1} = 2Q_{i+1/2}^{n+1}, \quad i = 1, \dots, N-1; \quad (12)$$

$$\frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{c^2 \tau} - \frac{1}{3} \frac{U_{i+1/2}^{n+1} - U_{i-1/2}^{n+1}}{h} + \frac{(\chi_a + \chi_s)_{i+1/2}^{n+1} + (\chi_a + \chi_s)_{i-1/2}^{n+1}}{2c} S_i^{n+1} = 0, \quad i = 2, \dots, N-1; \quad (13)$$

$$\frac{S_1^{n+1} - S_1^n}{c^2 \tau} - \frac{1}{3} \frac{U_{3/2}^{n+1} - U_{1/2}^{n+1}}{0,5h} + \frac{(\chi_a + \chi_s)_{1/2}^{n+1}}{c} S_1^{n+1} = 0; \quad (14)$$

$$\frac{S_N^{n+1} - S_N^n}{c^2 \tau} - \frac{1}{3} \frac{U_{N+1/2}^{n+1} - U_{N-1/2}^{n+1}}{0,5h} + \frac{(\chi_a + \chi_s)_{N-1/2}^{n+1}}{c} S_N^{n+1} = 0. \quad (15)$$

Уравнения (14), (15) отражают тот факт, что значения $U_{1/2}^{n+1}$, $U_{N+1/2}^{n+1}$ отнесены к левой грани первой ячейки и к правой грани последней ячейки соответственно. Отметим, что разностная аппроксимация (12) является консервативной.

Уравнения (12)–(15) дополняются граничными условиями (7), (8), записанными в разностном виде:

– на левой границе

$$\alpha_{left} S_1^{n+1} + \beta_{left} U_{1/2}^{n+1} + \gamma_{left} = 0;$$

– на правой границе

$$\alpha_{right} S_N^{n+1} + \beta_{right} U_{N+1/2}^{n+1} + \gamma_{right} = 0.$$

Исследование области применимости P_1 -приближения уравнения переноса излучения (качественная оценка)

По порядку величины $\frac{\partial I}{\partial t} \approx \frac{I}{T}$, где T – характерный масштаб времени; $\frac{\partial I}{\partial x} \approx \frac{I}{H}$, где H – характерный пространственный масштаб; $\frac{\chi_s}{2} \int_{-1}^1 I d\mu \approx \chi_s I$ [5]. Используя эти соотношения, уравнение (1) можно записать в виде

$$\frac{I}{cT} + \mu \frac{I}{H} + \chi_a I = Q. \quad (16)$$

Решив уравнение (16) относительно I , получим следующее выражение:

$$I = \frac{QH}{\left(\frac{H}{cT} + \chi_a H\right) + \mu}. \quad (17)$$

Очевидно, что I является линейной функцией от угловой переменной μ , если выполняется условие

$$\frac{H}{cT} + \chi_a H \gg 1. \quad (18)$$

Неравенство (18) означает, что излучение за характерное время распространяется на расстояние, много меньшее, чем характерный пространственный масштаб, и (или) длина свободного пробега по поглощению ($l = 1/\chi_a$) много меньше характерного пространственного масштаба. Области, в которых выполняется условие (18), называются оптически плотными.

Линейная зависимость интенсивности излучения от угловой переменной μ является достаточным условием применимости P_1 -приближения уравнения переноса, но не является необходимым. Если условие (18) выполнено, то применимо уравнение в P_1 -приближении. При невыполнении условия (18) уравнение в P_1 -приближении все же может давать приемлемый результат, что будет показано ниже.

С учетом соотношения (18) преобразуем выражение (17) к следующему виду:

$$I \approx A(1 - B\mu), \quad A = QHB, \quad B = \left(\frac{H}{cT} + \chi_a H\right)^{-1}. \quad (19)$$

Проинтегрировав выражение (19) по всем углам с весом $1/c$ и μ , получим соотношения

$$U \approx \frac{2A}{c}, \quad S \approx -\frac{2}{3}BA.$$

В силу соотношения (18) очевидно, что

$$|S| \approx \frac{1}{3}BcU \ll cU. \quad (20)$$

Таким образом, в области применимости P_1 -приближения уравнения переноса абсолютное значение потока много меньше, чем предельно допустимый поток¹.

Постановка внутренних граничных условий

Для определенности без ограничения общности допустим, что слева от точки склейки решается кинетическое уравнение, справа от точки склейки — P_1 -приближение уравнения переноса.

Считаем, что в точке склейки применимо уравнение в P_1 -приближении. Тогда интенсивность излучения в этой точке может быть записана в виде (3). Исходя из этого соотношения условие на правой границе для кинетического уравнения примет вид

$$I(\mu < 0) = 0,5(cU + 3\mu S), \quad (21)$$

где значения S и U взяты из расчета уравнений в P_1 -приближении². Если P_1 -приближение уравнения переноса применимо, то соотношение (21) обеспечивает положительность значений интенсивности.

¹Предельно допустимый поток реализуется в том случае, когда все частицы летят в направлении $\mu = 1$. Тогда $S = cU$.

²Граничное условие не удовлетворяет принципу максимума [6]. Граничное условие $I(\mu < 0) = 0,5cU$, удовлетворяющее принципу максимума, было исследовано М. Ю. Козмановым.

Граничное условие для P_1 -приближения уравнения переноса излучения задается в виде (7). При этом коэффициенты принимают следующий вид:

$$\alpha_{left} = 0,5; \quad \beta_{left} = 0,25c; \quad \gamma_{left} = -S_+, \quad (22)$$

где S_+ рассчитывается по формуле

$$S_+ = \int_0^1 \mu I d\mu. \quad (23)$$

Значения интенсивностей в формуле (23) берутся из решения кинетического уравнения.

При организации вычислений с использованием алгоритма склейки в расчете кинетического уравнения значения S , U в формуле (21) берутся с предыдущего шага по времени или с предыдущей итерации (в случае организации итерационного процесса). В расчете P_1 -приближения уравнения переноса значение S_+ вычисляется по значениям интенсивности, взятым с предыдущего шага по времени или с предыдущей итерации.

При счете задач итерационным методом итерации проводились до сходимости. Сходимость проверялась по плотности энергии излучения по следующему критерию:

$$|U^{s+1} - U^s| < \varepsilon (|U^s| + \eta). \quad (24)$$

Критерий (24) проверялся во всех точках по пространству. Константы сходимости в практических расчетах принимали значения $\varepsilon = 10^{-5}$, $\eta = 10^{-3}$.

Разностная аппроксимация внутренних граничных условий

Разностный аналог уравнения (21) имеет вид

$$I_{\tilde{i},j} = 0,5 \left(cU_{\tilde{i}-1/2} + 3\mu_j S_{\tilde{i}} \right), \quad j = \frac{M}{2}, \dots, M.$$

Отметим, что в разностной аппроксимации P_1 -приближения значение $U_{\tilde{i}-1/2}$ относится к граничной точке (см. уравнение (14)). Таким образом, $U_{\tilde{i}-1/2}$ и $S_{\tilde{i}}$ определяются на одной грани в точке склейки \tilde{i} .

Для уравнения переноса излучения в P_1 -приближении разностное выражение для расчета S_+ принимает вид

$$S_+ = \sum_{j=M/2}^M \mu_j I_{\tilde{i},j} \Delta\mu_j.$$

Здесь $I_{\tilde{i},j}$ берется из расчета кинетического уравнения в точке склейки.

О консервативности алгоритма склейки

Поток излучения в точке склейки \tilde{i} вычисляется дважды: исходя из расчета интенсивности излучения в точке склейки по кинетическому уравнению и исходя из расчета P_1 -приближения уравнения переноса излучения. Поток излучения на границе склейки можно записать следующим образом:

$$\int_{-1}^1 \mu I d\mu = \int_{-1}^0 \mu I d\mu + \int_0^1 \mu I d\mu. \quad (25)$$

Второе слагаемое в выражении (25) представляет собой S_+ (23). Если в первое слагаемое вместо интенсивности излучения поставить выражение (21), получим

$$S = \int_{-1}^1 \mu I d\mu = -0,25cU + 0,5S + S_+. \quad (26)$$

Выражение (26) можно записать в следующем виде:

$$0,25cU + 0,5S - S_+ = 0. \quad (27)$$

Соотношение (27) тождественно граничному условию для уравнения в диффузионном приближении (7) с коэффициентами (22).

Таким образом, если значения интенсивности излучения и величин U , S брать на одном временном слое, то алгоритм склейки будет консервативным. На практике возможна ситуация, когда значения указанных величин берутся с разных шагов по времени. Тогда о консервативности говорить не приходится.

Для контроля выполнения законов сохранения рассчитывается дисбаланс энергии системы. Закон сохранения энергии в интегральной форме записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \int_0^L U(x, t = T) dx - \int_0^L U(x, t = 0) dx + \int_0^T S_{right} dt - \int_0^T S_{left} dt + \\ & + \int_0^L \int_0^T \chi_a(x, t) U(x, t) dt dx = \int_0^L \int_0^T Q(x, t) dt dx. \end{aligned}$$

Если ввести обозначения

$$\begin{aligned} B_r &= \int_0^L U(x, t = T) dx - \int_0^L U(x, t = 0) dx; \\ B_l &= \int_0^L \int_0^T \chi_a(x, t) U(x, t) dt dx - \int_0^L \int_0^T Q(x, t) dt dx - \int_0^T S_{right} dt + \int_0^T S_{left} dt, \end{aligned}$$

то дисбаланс энергии системы (в процентах) будет рассчитываться по следующей формуле:

$$Db = \frac{B_r - B_l}{0,5(B_r + B_l)} \cdot 100.$$

Критерий выбора точки склейки

Использовать качественный критерий применимости P_1 -приближения уравнения переноса на практике не всегда возможно в силу сложности получения априорной оценки. Наиболее удобным с точки зрения проведения практических расчетов является критерий (20). На практике данный критерий применяется в следующем виде:

$$|S| < \frac{1}{3} C_d c U, \quad (28)$$

где $C_d < 1$ — константа, подбираемая для каждого класса задач индивидуально. Очевидно, если $C_d = 0$, то критерий (28) указывает на то, что во всей системе будет рассчитываться кинетическое уравнение. Если $C_d > 1$, то на границе соотношение (21) может давать отрицательное значение интенсивности излучения. При малых значениях C_d область применимости P_1 -приближения сужается и, как следствие, увеличиваются время решения и точность расчета.

В разностном виде соотношение (28) выглядит следующим образом:

$$\max \{|S_i^n|, |S_{i+1}^n|\} < \frac{1}{3} C_d c U_{i+1/2}^n. \quad (29)$$

Условие (29) проверяется в каждой пространственной точке по значениям с предыдущего шага по времени. Если условие (29) выполнено, то в интервале $i + 1/2$ рассчитывается уравнение в P_1 -приближении.

Примеры численных расчетов

Приведенные ниже задачи рассчитывались в четырех постановках:

1. Решение кинетического уравнения переноса излучения по TVD-схеме с ограничителем $\min \text{mod}$ второго порядка точности по пространству.
2. Решение уравнения переноса излучения в P_1 -приближении по схеме второго порядка точности по пространству.
3. Комбинированный счет с использованием кинетического уравнения переноса излучения и уравнения в P_1 -приближении, выполненный без итераций.
4. Комбинированный счет с использованием кинетического уравнения переноса излучения и уравнения в P_1 -приближении, выполненный итерационным методом.

Задача 1. Практический интерес представляет задача, в которой склейка кинетического уравнения с уравнением в P_1 -приближении проходит в точках, где использование P_1 -приближения находится на грани применимости.

В качестве такого примера рассматривается задача о распространении излучения в нерассеивающей среде ($\chi_s = 0$). Расчетная область $L [0; 1,02]$ делится на три части координатами $x_1 = 1/3, x_2 = 2/3$. В области $[x_1, x_2]$ задается коэффициент поглощения и изотропный источник $\chi_a = Q = 10$. В остальных областях $\chi_a = Q = 0$. Скорость света $c = 1$.

Постановка граничных условий на левой и правой границах осуществлялась в виде (2). Расчеты проводились с числом граней ячеек $N = 103$ и числом направлений по угловой переменной $M = 9$. Значения числа Куранта для кинетического уравнения: $K_k = c\tau/h = 0,5$ и $K_k = 10$. Для уравнения переноса в P_1 -приближении в оптически плотной области $K_{P_1} = \frac{c\tau}{3h^2 [1/(c\tau) + \chi_a + \chi_s]} \approx 0,08$ и $K_{P_1} \approx 16,7$. Для оптически прозрачных областей число Куранта принимает значения $K_{P_1} = \frac{1}{3} (c\tau/h)^2 \approx 0,08$ и $K_{P_1} \approx 33,3$.

Отметим, что в точках с координатами x_1, x_2 нельзя проводить склейку кинетического уравнения с уравнением в P_1 -приближении, поскольку в этих точках не выполняется критерий (20). Поэтому от точки с координатой x_1 отступаем вправо, а от точки x_2 — влево на некоторую *глубину* Δ (сдвиг в оптически плотную область). Области $[0; x_1 + \Delta]$ и $[x_2 - \Delta; 1,02]$ представляют собой области решения кинетического уравнения. В области $[x_1 + \Delta; x_2 - \Delta]$ решается уравнение переноса излучения в P_1 -приближении. Таким образом, имеются две точки склейки, отнесенные к координатам $x_1 + \Delta$ и $x_2 - \Delta$ соответственно.

Согласно критерию (18) P_1 -приближение уравнения переноса в поставленных условиях в оптически плотной области находится на грани применимости. Действительно, если за характерный размер взять размер оптически плотной области, а за характерное время взять время прохождения излучения через оптически плотную область, то $H/(c\tau) + \chi_a H = 4 \gg 1$.

Как показал расчет кинетического уравнения для предложенной задачи, угловая зависимость интенсивности излучения в указанных точках при различных значениях Δ не линейна (рис. 1). Казалось бы, в таких условиях невозможно проводить склейку кинетического уравнения с P_1 -приближением уравнения переноса. Единственное, что указывает на возможность такой склейки — это то, что в точках склейки обеспечивается положительность интенсивности излучения согласно (21). Это видно из рис. 2 и табл. 1. Отметим, что на рис. 1 и в табл. 1 величина Δ выражается в единицах длины свободного пробега $l = 1/\chi_a$.

Критерий применимости P_1 -приближения (28)

Δ	0,1l	0,2l	0,4l	l
$C_d = \frac{3 S }{cU}$	0,98663235	0,74357973	0,46717590	0,14799324

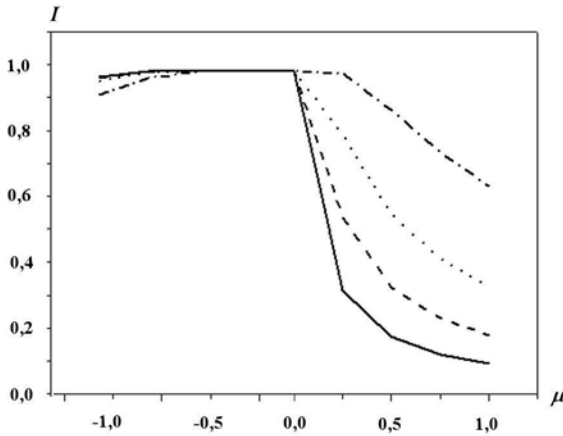


Рис. 1. Задача 1. Угловое распределение интенсивности излучения в точке $x = x_1 + \Delta$: — — $\Delta = 0,1l$; - - - $\Delta = 0,2l$; ... — $\Delta = 0,4l$; - . - - $\Delta = l$

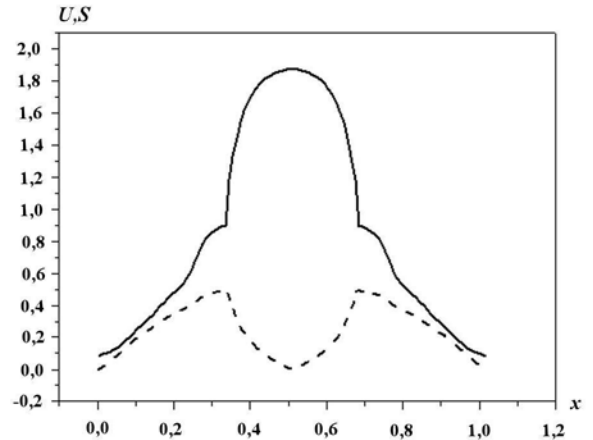


Рис. 2. Задача 1. Профили плотности энергии излучения (—) и абсолютного значения потока (---), рассчитанные из кинетического уравнения на момент времени $t = 0,4$

Величина C_d в табл. 1 вычислена по значениям S , U , полученным из расчета интенсивности излучения по кинетическому уравнению в точке склейки $x_1 + \Delta$. Исходя из данных табл. 1 можно сделать следующий вывод: с увеличением сдвига точки склейки в сторону оптически плотной области полученное значение критерия применимости все более удаляется от критического значения $C_d = 1$, что дает основание с большей уверенностью применять алгоритм склейки.

Как видно из рис. 3, а, слева, решение кинетического уравнения имеет заметные отличия от решения уравнения в P_1 -приближении. Как показала практика расчетов, применение алгоритма склейки в данной задаче допустимо с приемлемой точностью, которая зависит от положения точки склейки в глубине оптически плотной области и от наличия (отсутствия) итерационного процесса. В качестве критерия точности при расчете с применением алгоритма склейки выбрано отклонение от точного (кинетического) решения

$$L_1 = \frac{\int_0^L |U_3 - U_c| dx}{\int_0^L |U_3| dx},$$

где U_3 — эталонное решение кинетического уравнения; U_c — решение, полученное с использованием алгоритма склейки с различными параметрами.

На рис. 3 приведены результаты расчетов с учетом положения точек склейки, смещенных на $\Delta = 0,1l$. Можно заметить, что применение алгоритма склейки, особенно при счете с итерациями, существенно улучшает качество решения в сравнении с результатом расчета в P_1 -приближении, выполненного без применения алгоритма склейки. Влияние положения точки склейки кинетического уравнения с уравнением в P_1 -приближении и числа Куранта на решение представлено в табл. 2 и на рис. 4.

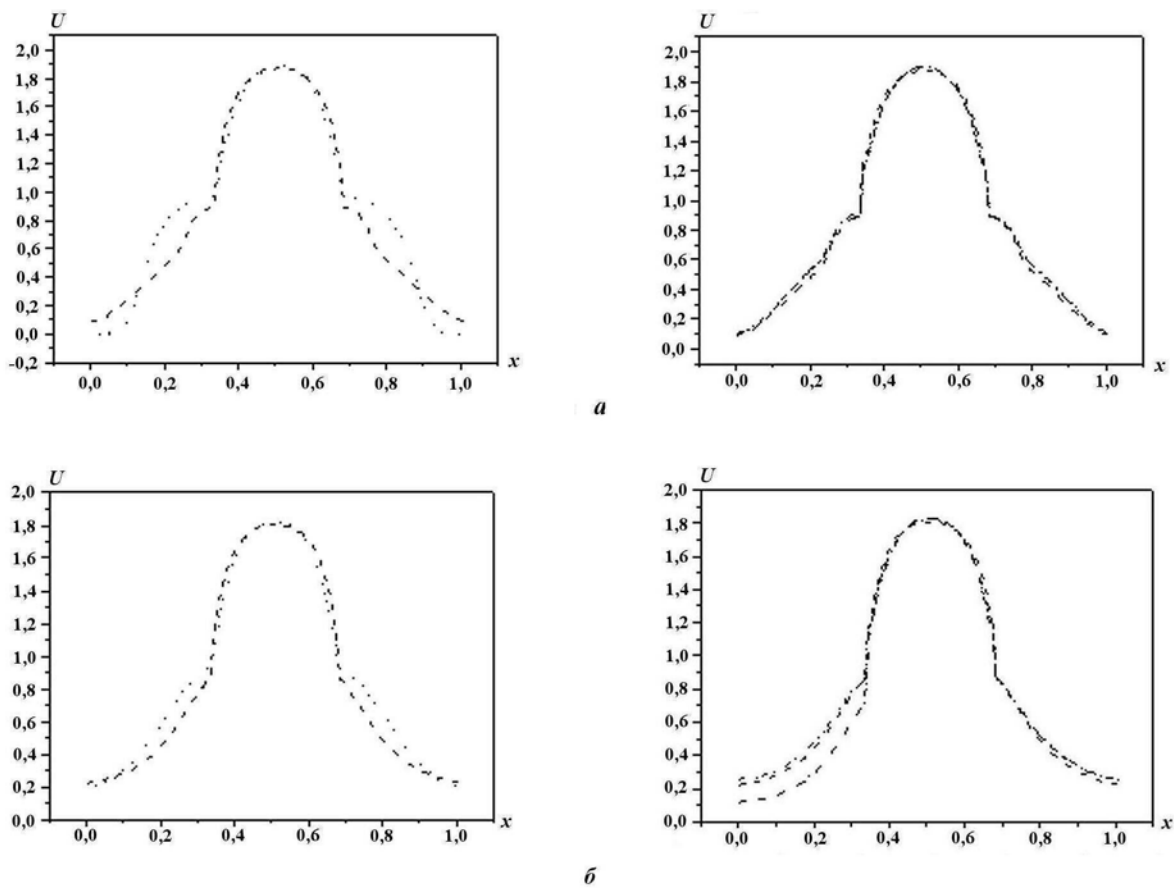


Рис. 3. Пространственное распределение плотности энергии излучения, полученное при расчете задачи 1 в различных постановках при $K_k = 0,5$ (а) и $K_k = 10$ (б): - - - - постановка 1; \cdots — постановка 2; - · - · — постановка 3; - · - - — постановка 4

Таблица 2

Задача 1. Погрешность L_1 (%) алгоритма склейки относительно эталонного решения

K_k	Расчет	Δ		
		0,1l	0,2l	0,4l
0,5	С итерациями	3,33	3,11	1,81
	Без итераций	3,45	3,08	2,17
2	С итерациями	3,34	2,77	1,83
	Без итераций	2,74	2,6	2,02
10	С итерациями	3,25	2,71	1,79
	Без итераций	7,81	6,68	5,08

Из табл. 2 видно, что точность решения в сравнении с эталонным решением возрастает с увеличением значения Δ . Как показывают данные табл. 3, расчет без итераций с изменением значений Δ увеличивает дисбаланс энергии системы. Отметим, что при расчетах в постановке 4 количество итераций не превышает четырех.

Задача 2. Интересным для исследования представляется случай, когда коэффициент поглощения и источник излучения являются функциями координаты и времени. Рассматривается следу-

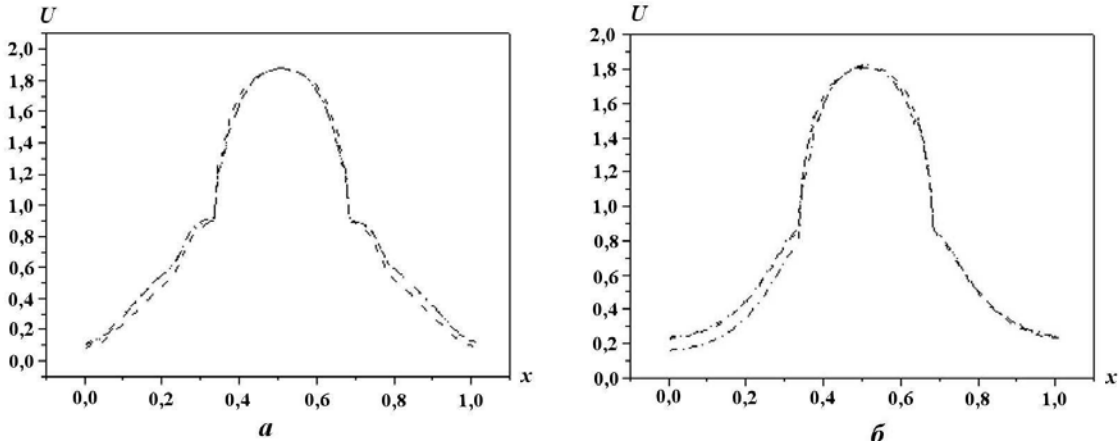


Рис. 4. Пространственное распределение плотности энергии излучения, полученное при расчете задачи 1 в различных постановках, $\Delta = 0,4l$: а — $K_k = 0,5$; б — $K_k = 10$; - - - — постановка 1; - · - — постановка 3; · · · — постановка 4

Таблица 3

Задача 1. Дисбаланс энергии системы (%) в расчетах без итераций по алгоритму склейки

K_k	Δ		
	0,1l	0,2l	0,4l
0,5	0,59	0,67	0,7
2	1,85	2,14	2,38
10	4,9	5,56	6,4

ющая задача. Коэффициент рассеяния $\chi_s = 0$; коэффициент поглощения и источник излучения рассчитываются по формулам

$$Q(x, t) = \chi_a(x, t) = C_1 \exp\left(-\left(\frac{x - x_0}{\Delta}\right)^2\right), \quad x_0 = \frac{L}{2} + \frac{L}{4} \sin\left(2\pi \frac{t}{t_{end}}\right). \quad (30)$$

Здесь $C_1 = 90 = \text{const}$; x — координата; t — время; $L[0; 1,02]$ — размер системы; $t_{end} = 0,4$ — время окончания счета. Графическое изображение функции (30) представлено на рис. 5. На границах рассчитываемой системы задается нулевой поток.

Задача рассчитывается с теми же шагами по пространству и времени, что и задача 1. Константы автоматического выбора точек склейки: $C_d = 0,05$; $C_d = 0,25$; $C_d = 0,8$.

Как видно из рис. 6, а, б и табл. 4, решения, полученные с использованием алгоритма склейки при значении $C_d = 0,05$, дают минимальные отклонения от эталонного решения для всех приведенных значений чисел Куранта. Из табл. 4 видно, что с увеличением константы C_d количество интервалов,

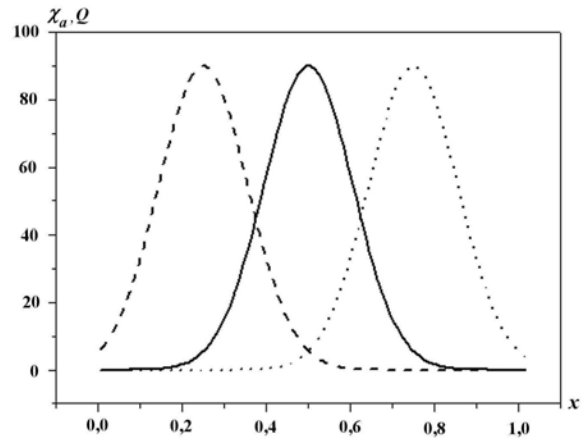


Рис. 5. Задача 2. Распределение коэффициента поглощения χ_a и источника излучения Q на различные моменты времени: — — $t = 0$; - - - — $t = \frac{1}{4}t_{end}$; · · · — $t = \frac{3}{4}t_{end}$

в которых рассчитывается уравнение в P_1 -приближении, увеличивается, а точность решения падает (рис. 6, в–е). Отметим, что число итераций во всех расчетах не превышало четырех.

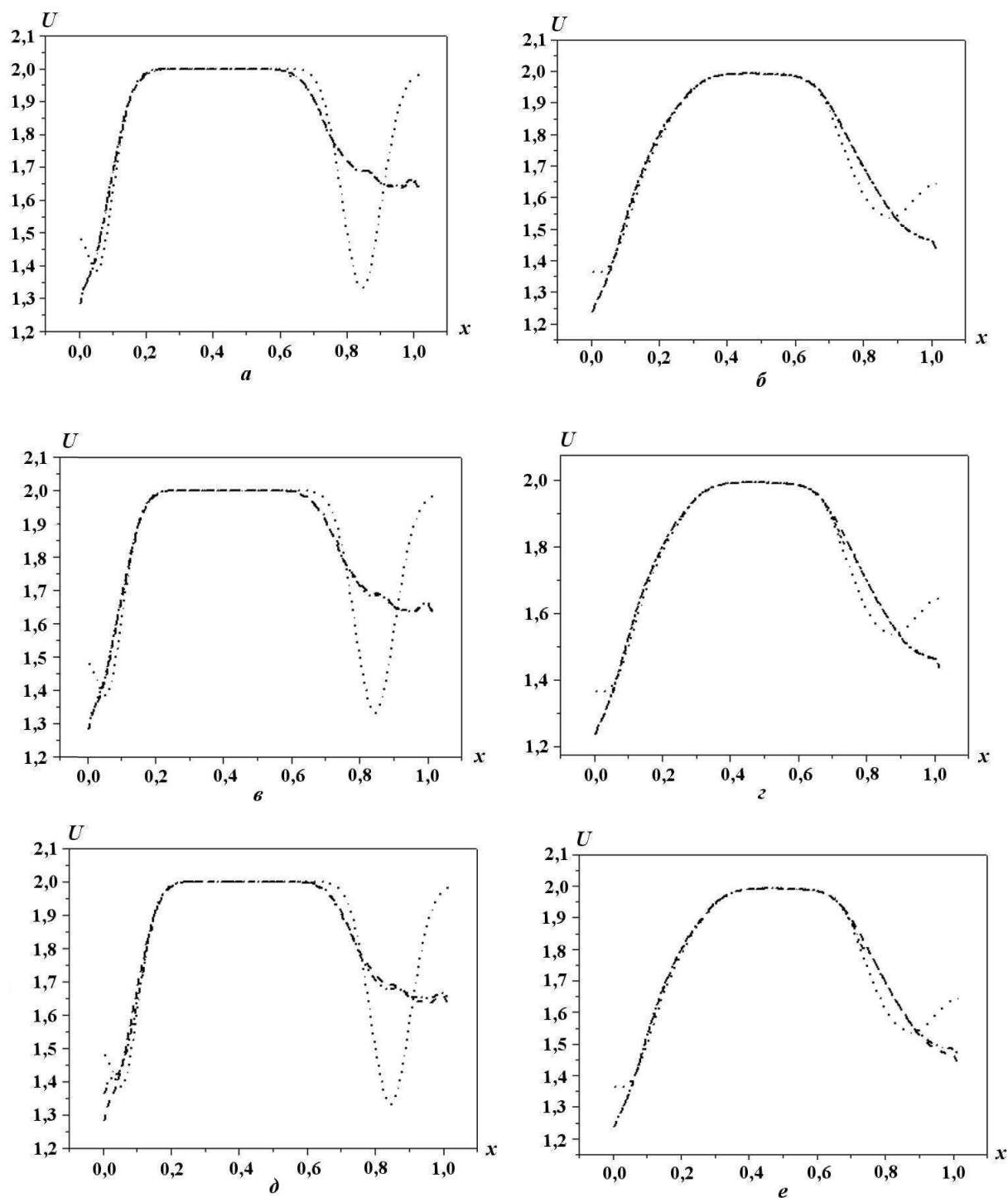


Рис. 6. Задача 2. Профили плотности энергии излучения, полученные при расчетах в разных постановках: $a - K_k = 0,5, C_d = 0,05$; $b - K_k = 10, C_d = 0,05$; $в - K_k = 0,5, C_d = 0,25$; $г - K_k = 10, C_d = 0,25$; $д - K_k = 0,5, C_d = 0,8$; $е - K_k = 10, C_d = 0,8$; - - - - постановка 1; \cdots - постановка 2; - · - постановка 4

Задача 2. Количество диффузионных точек (%). Погрешность L_1 (%) алгоритма склейки относительно эталонного решения

C_d	$K_k = 0,5$		$K_k = 2$		$K_k = 10$	
	Кол-во диффуз. точек	L_1	Кол-во диффуз. точек	L_1	Кол-во диффуз. точек	L_1
0,05	29	0,0009	27	0,0014	21	0,0072
0,25	40	0,0024	38	0,003	30	0,01
0,8	48	0,022	47	0,65	39	0,061

Заключение

Предложен и исследован простой критерий автоматического выбора приближения. Для реализации алгоритма склейки рассмотрена постановка внутренних граничных условий. На примере расчета методических задач показана действенность алгоритма склейки кинетического уравнения с P_1 -приближением уравнения переноса.

Список литературы

1. Четверушкин Б. Н. Кинетически согласованные схемы в газовой динамике. М.: МГУ, 1999.
2. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
3. Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к DS_n -методу решения уравнения переноса теплового излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 37–48.
4. Егорова А. С., Карлыханов Н. Г. Решение кинетического уравнения переноса излучения методом усредненных косинусов // Там же. 2011. Вып. 3. С. 29–38.
5. Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975.
6. Андреев Е. С., Козманов М. Ю., Рачилов Е. Б. Принцип максимума для системы уравнений энергии и нестационарного переноса излучения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1983. Т. 23, № 1. С. 152–159.

Статья поступила в редакцию 02.08.11.

УДК 519.6+533.9

МЕТОДИКА МИМОЗА-НДЗД. РАСЧЕТ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ СПЕКТРАЛЬНОГО ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

А. В. Бабанов, С. А. Бельков, С. В. Бондаренко,
В. В. Ватулин, О. А. Винокуров, И. Н. Гречишкина, В. В. Змушко,
Т. Б. Измайлова, Е. И. Митрофанов, Н. А. Рябикина, Б. Н. Шамраев
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Рассматривается трехмерная методика МИМОЗА-НДЗД, которая позволяет моделировать процессы, требующие проведения совместных расчетов движения горячей излучающей плазмы, переноса излучения в приближении многогрупповой диффузии и кинетики ионизации с использованием двух моделей атома. Методика позволяет учесть эффекты нестационарного неравновесного спектрального переноса рентгеновского излучения.

Описаны основные уравнения, используемые в методике, приведена разностная аппроксимация решения трехмерного уравнения диффузии. Представлены результаты расчета в трехмерной постановке.

Ключевые слова: лазерное излучение, трехмерная диффузия, двухтемпературная газовая динамика со спектральным переносом излучения, мишень, ударная волна, неоднородность, сглаживание.

Введение

Достижение условий зажигания термоядерного топлива при сжатии мишеней в схемах лазерного термоядерного синтеза является основной проблемой как при прямом, так и непрямом способе сжатия. В настоящее время мощности существующих лазерных установок еще не достаточны для осуществления экспериментальной вспышки с положительным балансом энергии, выделяемой при термоядерном горении топлива. На данных установках в основном исследуются отдельные процессы и явления, необходимые для реализации условий горения. В связи с этим оптимизация параметров мишени и лазерного импульса на зажигание невозможна без расчетного моделирования.

Анализ и расчетное моделирование экспериментов, проводимых на существующих лазерных установках, требуют учета большого числа разнообразных физических процессов, происходящих при взаимодействии лазерного излучения с веществом. Это процессы поглощения и рассеяния (в том числе нелинейные) мощного ла-

зерного излучения в короне, электронная и ионная теплопроводность, а также спектральный перенос рентгеновского излучения, генерируемого в нестационарной неравновесной высокотемпературной плазме, термоядерные реакции и перенос энергии быстрыми заряженными и нейтральными частицами (нейтроны, протоны и α -частицы), возникающими в термоядерных реакциях, и многие другие.

Наиболее полный учет этих процессов осуществляется в *одномерных* газодинамических программах СНДП [1], ЗАРЯ [2]. Однако возможности исследования процессов развития газодинамических неустойчивостей, влияния эффектов симметрии на конечные параметры (плотность, температура сжатого топлива) крайне ограничены или вообще недостижимы при одномерном моделировании. Вместе с тем нестационарные и неравновесные эффекты, характерные для лазерной плазмы, оказывают существенное влияние на динамику движения мишени и развитие возмущений. Все это определяет необходимость разработки и применения *двумерных* и *трехмерных* методик для расши-

рения возможностей моделирования лазерной плазмы.

Среди двумерных методик следует отметить методики МИМОЗА-НД [3], LASNEX [4], САТУРН-3 [5]. По методике МИМОЗА-НД выполнялось и выполняется большое количество расчетов по моделированию экспериментов, проводимых на лазерных установках ИСКРА-5 и ЛУЧ. Конструкции мишеней выбираются таким образом, чтобы по возможности иметь цилиндрическую симметрию и использовать для ее расчета двумерные программы. К таким мишеням относятся мишени ИЛЛЮМИНАТОР [6] и ЛАБИРИНТ [7].

Однако в большинстве случаев мишени представляют собой трехмерную конструкцию либо подвод энергии осуществляется трехмерным образом, как в экспериментах со сферическим боксом, проводимых на лазерной установке ИСКРА-5 [8]. Поэтому для более точного описания подобных экспериментов необходимо создание трехмерных программ. Среди таких программ следует отметить эйлерово-лагранжеву программу HYDRA [9], которая используется для моделирования экспериментов на лазерной установке NIF в Ливерморской национальной лаборатории (LLNL) США.

Данная статья посвящена описанию трехмерной методики МИМОЗА-НДЗД, предназначенной для моделирования в трехмерной геометрии экспериментов, проводимых на лазерных установках ИСКРА-5, ЛУЧ и будущей установке УФЛ 2М. Создание такой методики стало возможным с появлением в математическом отделении РФЯЦ-ВНИИЭФ высокопроизводительного вычислительного комплекса МВК. Методика МИМОЗА-НДЗД является аналогом двумерной методики МИМОЗА-НД [3] и позволяет рассчитывать те же физические процессы: поглощение и рассеяние лазерного излучения в короне, электронную и ионную теплопроводность, спектральный перенос рентгеновского излучения, термоядерные реакции, перенос энергии α -частицами, возникающими в термоядерных реакциях.

Основные положения

При интегрировании трехмерных уравнений газовой динамики в методике МИМОЗА-НДЗД, используется лагранжево-эйлеров метод, который в настоящее время является наиболее эф-

фективным при решении задач механики сплошной среды с большими деформациями.

Для аппроксимации уравнений газовой динамики используется разностная схема, базирующаяся на схеме Д [10]. На каждом счетном шаге строится новая разностная трехмерная сетка, в которой по возможности исправляются сильные деформации старой разностной сетки. При построении новой сетки координаты узла рассчитываются на основе координат узлов старой сетки, являющихся ближайшими *соседями* данного узла.

В методике МИМОЗА-НДЗД используются обобщенные на трехмерный случай двумерные программы построения расчетной сетки и пересчета величин [11]. При пересчете конвективных потоков применяется алгоритм, основанный на расщеплении по направлениям и использовании одномерного алгоритма повышенной точности. Повышение точности достигается введением внутри каждой ячейки распределения пересчитываемых величин, отличного от постоянного значения [12].

При *параллельных* вычислениях используется трехмерная геометрическая декомпозиция по процессорам.

Основные уравнения

Система уравнений трехтемпературной газовой динамики имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{V}}{dt} &= -\frac{1}{\rho} \text{grad}(P + Q); & \frac{d\vec{Z}}{dt} &= \vec{V}; \\ \frac{d\rho}{dt} &= -\rho \text{div}\vec{V}; & \frac{dE_f}{dt} &= -P_f \frac{d\left(\frac{1}{\rho}\right)}{dt}; \\ \frac{dE_e}{dt} &= -P_e \frac{d\left(\frac{1}{\rho}\right)}{dt}; & \frac{dE_i}{dt} &= -(P_i + Q) \frac{d\left(\frac{1}{\rho}\right)}{dt}. \end{aligned}$$

Здесь $\vec{Z} = (x, y, z)$; $\vec{V} = (u, v, w)$; Q — вязкость; $P = P_f + P_e + P_i$, $P_f = P_f(\rho, E_f)$, $P_e = P_e(\rho, E_e)$, $P_i = P_i(\rho, E_i)$, где P_f, E_f — давление и энергия излучения; P_e, E_e — давление и энергия электронов; P_i, E_i — давление и энергия ионов.

При интегрировании этих уравнений на лагранжевом этапе расчета, как указывалось выше, используется разностная схема на базе схемы Д. Для *размазывания* ударных волн (УВ) вводится комбинация квадратичной и линейной вязкостей [11].

Для подавления коротковолновых возмущений применяется процедура сглаживания нормальных к линии сетки компонент скорости. Сглаживание осуществляется с помощью оператора четвертых разностей [13]. Подбирая правильным образом параметры оператора сглаживания, можно добиться того, что самые высокочастотные возмущения за относительно небольшое число счетных шагов по времени уменьшаются на несколько десятков порядков. Возмущение, захватывающее четыре счетные точки (в разложении такого возмущения в ряд Фурье будет преобладать четвертая гармоника), уменьшится примерно на 1%; длинноволновые возмущения будут еще менее чувствительны к сглаживанию. Таким образом, сглаживание четвертыми разностями сильно дискриминирует гармоники в зависимости от их номера: подавляет счетные эффекты, проявляющиеся на высоких гармониках, и слабо влияет на низкие гармоники, описывающие решение задачи. Выбором коэффициентов оператора сглаживания можно регулировать положение границы раздела между теми и другими гармониками.

Столь подробное описание процедуры сглаживания объясняется тем, что при расчете мишеней очень большое значение имеет выбор расчетной сетки. Особенно это важно для сферических мишеней, в которых плотность газа в процессе их сжатия может увеличиваться в 1000 раз по сравнению с первоначальной плотностью и при расчете которых все возмущения нарастают экспоненциально по отношению к начальной и конечной плотности.

Уравнение спектрального переноса излучения в диффузионном приближении имеет следующий вид [14]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_\nu}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{S}_\nu &= j_\nu - c\chi_\nu^{abs} U_\nu, \\ \vec{S}_\nu &= -\frac{c}{3\tilde{\chi}_\nu^{abs}} \nabla U_\nu, \\ \rho \frac{\partial E_e}{\partial t} &= \int_0^\infty (c\chi_\nu^{abs} U_\nu - j_\nu) d\nu, \end{aligned} \quad (1)$$

где U_ν — спектральная плотность энергии рентгеновского излучения в единице объема; j_ν — спектральная плотность мощности рентгеновского излучения единицы объема плазмы; χ_ν^{abs} — полный спектральный коэффициент поглощения рентгеновского излучения; c — скорость света; E_e — внутренняя энергия электронов.

Разобьем спектральный интервал на K групп с границами $\{\varepsilon_\nu, \varepsilon_{\nu+1}\}$. Проинтегрируем уравнение (1) по группе с номером ν . Тогда, вводя обозначения $\tilde{U}_\nu = \int_{\varepsilon_\nu}^{\varepsilon_{\nu+1}} U_\nu d\varepsilon$, $\Delta j_\nu = \int_{\varepsilon_\nu}^{\varepsilon_{\nu+1}} j_\nu d\varepsilon$, $\tilde{\chi}_\nu^{abs} = \frac{\int_{\varepsilon_\nu}^{\varepsilon_{\nu+1}} \chi_\nu d\varepsilon}{\varepsilon_{\nu+1} - \varepsilon_\nu}$ и переходя от уравнения для спектральной плотности излучения к уравнению для энергии излучения в интервале с номером ν , получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{U}_\nu}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{S}_\nu &= \Delta j_\nu - c\tilde{\chi}_\nu^{abs} \tilde{U}_\nu; \\ \vec{S}_\nu &= -\frac{c}{3\tilde{\chi}_\nu^{abs}} \nabla \tilde{U}_\nu; \\ \rho \frac{\partial E_e}{\partial t} &= \sum_\nu (c\tilde{\chi}_\nu^{abs} \tilde{U}_\nu - \Delta j_\nu). \end{aligned}$$

Для решения этих уравнений используется неявная разностная схема, основанная на дискретной записи закона сохранения плотности излучения для каждой шестигранной ячейки сетки. Разностная аппроксимация уравнения диффузии будет рассмотрена ниже.

Уравнение электронной теплопроводности имеет следующий вид:

$$\frac{dE_e}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla (\chi_e \nabla T_e),$$

где T_e — температура электронов; χ_e — коэффициент электронной теплопроводности.

Аналогично, уравнение ионной теплопроводности

$$\frac{dE_i}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla (\chi_i \nabla T_i),$$

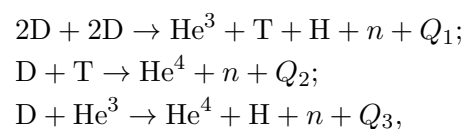
где T_i — температура ионов; χ_i — коэффициент ионной теплопроводности.

Система уравнений, описывающая электронно-ионную релаксацию:

$$\begin{aligned} \frac{dE_e}{dt} &= A(\rho, T_e) (T_i - T_e); \\ \frac{dE_i}{dt} &= -A(\rho, T_e) (T_i - T_e), \end{aligned}$$

где $A(\rho, T_e)$ — коэффициент электронно-ионной релаксации.

Рассчитываются три основные термоядерные реакции:



где Q_1, Q_2, Q_3 обозначают энерговыделение в этих реакциях (без учета энергии нейтронов).

Кроме того, при расчете спектральных коэффициентов поглощения и излучения плазмы, коэффициентов теплопроводности и электронно-ионной релаксации, а также уравнения состояния электронов решаются уравнения кинетики ионизации и возбуждения ионов плазмы в приближении среднего иона [15].

Разностная аппроксимация трехмерного уравнения диффузии

Решение трехмерных уравнений диффузии осуществляется на разностной сетке, которая состоит из шестигранных ячеек и является структурированной вдоль всех трех направлений.

При расчете спектрального переноса излучения в диффузионном приближении, переноса энергии электронами и ионами используется одна и та же пространственная аппроксимация оператора $\text{div } \chi \text{ grad } U$. Поэтому ограничимся рассмотрением разностной схемы расчета спектрального переноса излучения.

Рассмотрим уравнение диффузии без правой части:

$$\frac{\partial U_\nu}{\partial t} + \text{div } \vec{S}_\nu = 0, \quad \vec{S}_\nu = -\frac{c}{3k_\nu^{abs}} \nabla U_\nu,$$

где ν — номер спектральной группы.

Для решения этого уравнения используется неявная разностная схема, основанная на дискретной записи закона сохранения плотности излучения для каждой шестигранной ячейки сетки:

$$\frac{U_\nu^{n+1} - U_\nu^n}{\Delta t} + \frac{\sum_{i=1}^6 L_i S_\nu^i}{V} = 0,$$

где L_i — площадь грани; V — объем ячейки; Δt — шаг по времени.

Для решения полученной в результате аппроксимации линейной системы неявных разностных уравнений используется библиотека параллельных решателей PMLP [16].

При вычислении потока излучения через сторону ячейки вводится ограничение на его значение через ограничение κ_ν^{abs} — полного спектрального коэффициента поглощения рентгеновского излучения.

Также вводится ограничение потока электронов через сторону ячейки при расчете уравнения электронной теплопроводности. Этот по-

ток ограничивается некоторым предельным значением.

Задача о сжатии сферической мишени рентгеновским излучением

В качестве тестового расчета для методики МИМОЗА-НДЗД был выбран расчет генерации нейтронов при сжатии сферической стеклянной капсулы, наполненной DT-газом, под действием рентгеновского импульса.

Для расчета временной зависимости и пространственного распределения рентгеновского излучения на поверхности капсулы использовалась программа СНД-ЛИРА [17]. В этом расчете бокс-конвертер представлял собой медную сферическую оболочку, покрытую изнутри слоем золота; 12 лазерных пучков вводились внутрь бокса через 6 отверстий. Геометрия расчета соответствовала условиям экспериментов по непрямому облучению, проводимых на установке ИСКРА-5 [18].

В результате выполненного по программе СНД-ЛИРА расчета была получена плотность рентгеновского излучения на поверхности капсулы $U_\nu(\theta, \varphi, t)$ (θ и φ — полярный и азимутальный углы, определяющие положение точки на поверхности капсулы; t — момент времени), которая в дальнейшем использовалась в расчетах сжатия капсулы по методике МИМОЗА-НДЗД.

Тестовый расчет в сферически-симметричной постановке. Для тестового сферически-симметричного расчета по методике МИМОЗА-НДЗД полученное распределение рентгеновского излучения $U_\nu(\theta, \varphi, t)$ было усреднено по углам θ и φ :

$$\langle U_\nu(t) \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi U_\nu(\theta, \varphi, t) \sin(\theta) d\theta d\varphi}{4\pi}.$$

На рис. 1 приведена временная зависимость эффективной температуры рентгеновского излу-

чения $T_\gamma(t) = \left(\frac{\int_0^\infty \langle U_\nu(t) \rangle d\nu}{\sigma} \right)^{1/4}$, σ — постоянная Стефана–Больцмана. Как видно из этого рисунка, максимальная температура составляет 135 эВ.

На рис. 2 приведен спектр рентгеновского излучения в момент времени $t = 0,8$ нс, когда его температура максимальна.

В расчетах по методике МИМОЗА-НДЗД учитывались следующие физические процессы: газодинамика в двухтемпературном приближении, электронная и ионная теплопроводности с электронно-ионной релаксацией, перенос рентгеновского излучения в приближении многогрупповой диффузии. Кинетика ионизации плазмы, спектральные пробеги и излучательные характеристики плазмы, а также уравнения состояния рассчитывались в приближении среднего иона. Перенос рентгеновского излучения рассчитывался в спектральном диапазоне от 0 до 5 кэВ, который был разбит на 46 групп. В качестве граничного условия для диффузии на внешней поверх-

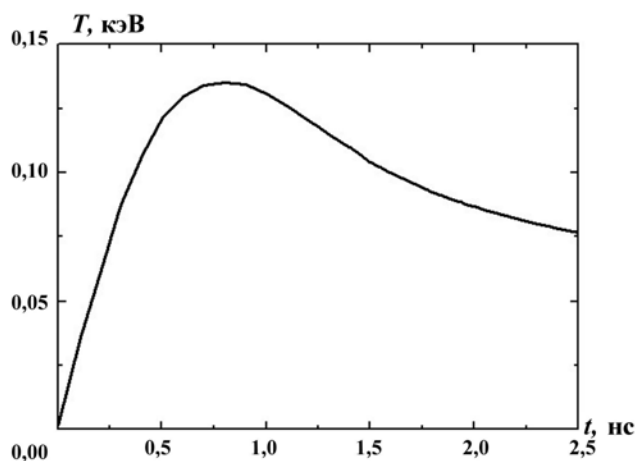


Рис. 1. Временная зависимость эффективной температуры рентгеновского излучения

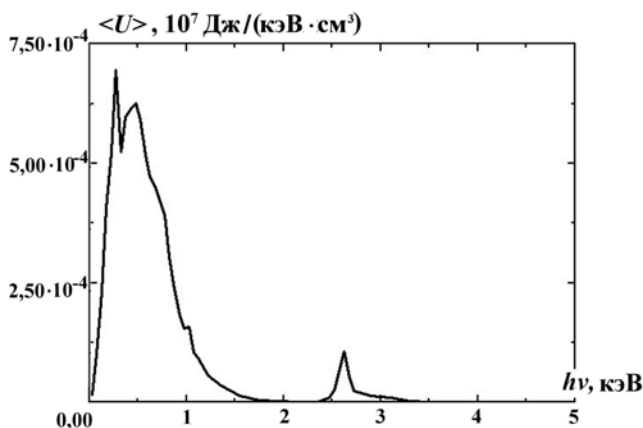


Рис. 2. Спектр рентгеновского излучения в момент времени $t = 0,8$ нс

ности капсулы задавалась спектральная плотность излучения $\langle U_\nu(t) \rangle$.

Задача считалась в секторном приближении: по θ — от $85,5$ до $94,5^\circ$, по φ — от 0 до 9° . Сетка выбиралась следующим образом: по углу θ брались 3 столбца, по углу φ — 3 листа, по радиусу — 90 строк.

Впоследствии были проведены аналогичные расчеты по двумерной методике МИМОЗА-НД и по одномерной программе СНДП.

На рис. 3 представлены временные зависимости скорости нейтронного выхода. В расчетах по методикам МИМОЗА-НДЗД и МИМОЗА-НД ускорение оболочки на начальной стадии ($t < 1,5$ нс) происходит несколько быстрее, чем в расчете по программе СНДП. Поэтому и момент фокусировки, и момент максимального сжатия в расчете по программе СНДП наступают примерно на 30—40 пс позднее, чем соответствующие моменты в расчетах по двумерной и трехмерной методикам. Максимальное объемное сжатие в расчете по методике МИМОЗА-НДЗД достигает $\approx 1,4 \cdot 10^3$, по методике МИМОЗА-НД — $\approx 1,4 \cdot 10^3$, а по программе СНДП — $\approx 1,3 \times 10^3$. Нейтронный выход в расчете по методике МИМОЗА-НДЗД составил $\approx 9,4 \cdot 10^7$, по методике МИМОЗА-НД — $\approx 1,0 \cdot 10^8$, а по программе СНДП — $\approx 8,5 \cdot 10^7$.

Таким образом, наблюдается удовлетворительное согласие результатов сферически-симметричных расчетов по различным программам (отличие нейтронного выхода не превышает 11%).

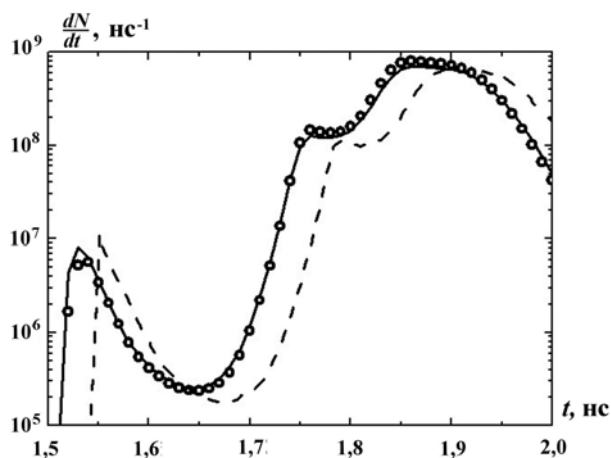


Рис. 3. Временные зависимости скорости нейтронного выхода: — — расчет по методике МИМОЗА-НДЗД; \circ — расчет по методике МИМОЗА-НД; - - - - расчет по программе СНДП

Расчет в трехмерной постановке. В *трехмерном расчете* учитывались те же физические процессы, что и в сферически-симметричном. В качестве граничного условия для спектральной диффузии на внешней поверхности капсулы задавалась плотность излучения $U_\nu(\theta, \varphi, t)$.

Как показал анализ пространственного распределения $U_\nu(\theta, \varphi, t)$, среднеквадратичная неоднородность рентгеновского излучения на момент максимума средней плотности излучения ($t = 0,8$ нс) составляет $\varepsilon_{rms} = 1,8\%$. На рис. 4 приведены временные зависимости *парциальных* неоднородностей ε_n , характеризующих различные пространственные масштабы, которые присутствуют в структуре неоднородности рентгеновского излучения на поверхности капсулы (n — номер сферической гармоники); ε_n связаны со среднеквадратичной неоднородностью ε_{rms} соотношением

$$\varepsilon_{rms} = \sqrt{\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n^2}.$$

Перенос рентгеновского излучения рассчитывался на той же спектральной сетке. Задача считалась в полном развороте: по φ — от 0 до 360° , по θ — от 0 до 180° . Расчетная пространственная сетка строилась следующим образом: по радиусу бралось 90 строк, по углу θ — 90 столбцов, по углу φ — 180 листов.

На рис. 5 приведена временная зависимость нейтронного выхода, полученная в трехмерном расчете по методике МИМОЗА-НДЗД. Для сравнения на этом же рисунке представлена аналогичная зависимость, полученная в сферически-симметричном расчете по этой же методике.

Генерация нейтронов происходит следующим образом. Рентгеновский импульс облучает стеклянную оболочку, приводя ее в движение. Обо-

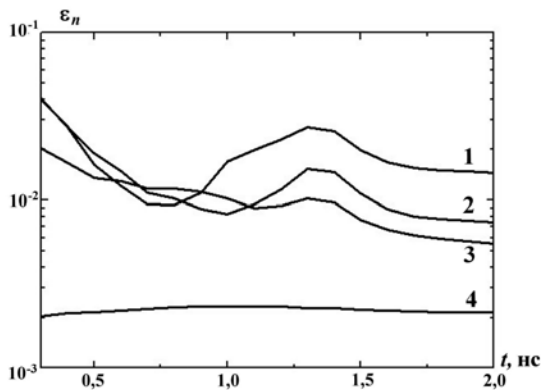


Рис. 4. Временные зависимости ε_n : 1 — ε_1 ; 2 — ε_2 ; 3 — ε_3 ; 4 — ε_4

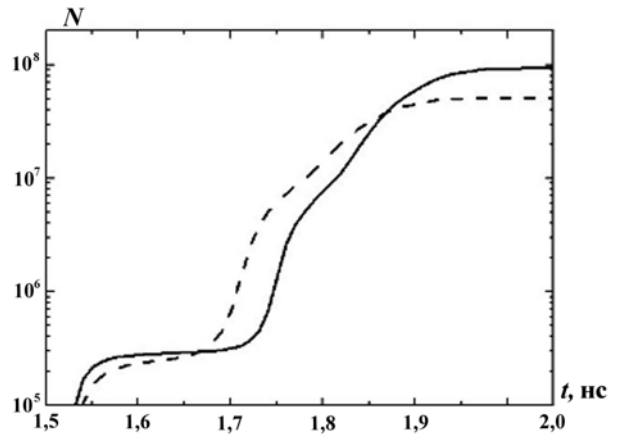


Рис. 5. Временные зависимости нейтронного выхода: — — — — трехмерный расчет; — — — — сферически-симметричный расчет

лочка, в свою очередь, начинает сжимать ДТ-газ. В случае сферически-симметричного облучения по газу распространяется сходящаяся к центру сферическая УВ. В некоторый момент времени, который принято называть моментом фокусировки, УВ приходит в центр. В этот момент температура газа в центре капсулы резко возрастает и начинается генерация нейтронов. По газу, сжатому первой УВ, начинает распространяться отраженная (от центра) УВ. Однако газ, нагретый до температур в несколько килоэлектронвольт, начинает остывать (за счет электронной теплопроводности) и скорость генерации нейтронов падает. В некоторый момент времени отраженная УВ достигнет границы *газ-оболочка*. Если оболочка легкая, то отраженная УВ практически полностью остановит ее движение к центру и генерация нейтронов закончится, т. е. во временной зависимости скорости генерации нейтронов будет только один максимум, обусловленный ударным сжатием газа. Если же оболочка тяжелая, то отраженная от центра УВ лишь немного затормозит оболочку, сжатие газа и генерация нейтронов продолжатся (в дальнейшем эту стадию будем называть *дожатием*). В результате во временной зависимости скорости генерации нейтронов будет еще один максимум. Это так называемый *абляционный режим* сжатия.

Как видно из рис. 3, при выбранных параметрах мишени (давление газа, толщина капсулы) и рентгеновского импульса в данной задаче сжатие происходит в абляционном режиме и основная часть нейтронов генерируется при дожатии.

В трехмерном расчете УВ в газе фокусируется в момент времени $t = 1,52$ нс и фокусировка происходит на расстоянии $\Delta R_{foc} \approx 4 \div 5$ мкм от геометрического центра капсулы в начальный момент времени. При этом в момент фокусировки средний радиус границы *газ–стекло* $\langle R \rangle = \left(\frac{3V_{DT}}{4\pi} \right)^{1/3} \approx 43$ мкм (V_{DT} — объем газа в момент фокусировки). То есть асимметрия рентгеновского излучения, сжимающего капсулу, слабо влияет на ударное сжатие газа, которое происходит практически сферически-симметрично $\left(\frac{\Delta R_{foc}}{\langle R \rangle} \ll 1 \right)$. Поэтому, как видно из рис. 5, нейтронный выход, который генерируется при ударном сжатии газа ($t < 1,62$ нс), в трехмерном расчете составляет $\approx 2,5 \cdot 10^5$, что всего лишь на 12 % меньше, чем в сферически-симметричном расчете ($\approx 2,8 \cdot 10^5$).

На рис. 6, *a*, *б* приведены поверхности, которые представляют собой границы между газом и оболочкой на два момента времени: $t = 1,54$ нс —

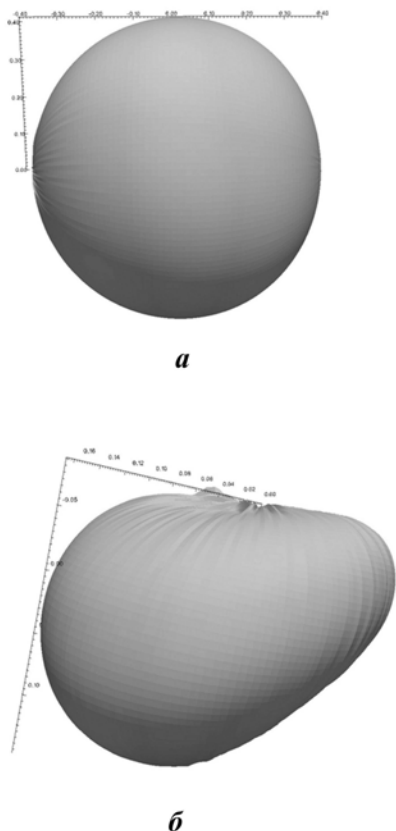


Рис. 6. Границы между газом и оболочкой на два момента времени: *a* — $t = 1,54$ нс; *б* — $t = 1,83$ нс

момент максимума скорости генерации нейтронов на стадии ударного сжатия; $t = 1,83$ нс — момент максимума скорости генерации нейтронов при дожатии. Как видно из этого рисунка, в момент времени $t = 1,54$ нс граница между газом и стеклом практически не отличается от сферы, тогда как в момент $t = 1,83$ нс граница сильно деформирована. То есть на стадии дожатия неоднородность рентгеновского излучения сказывается существенно сильнее. Полный нейтронный выход в трехмерном расчете составляет $\approx 5,1 \cdot 10^7$, тогда как в сферически-симметричном расчете $\approx 9,4 \cdot 10^7$.

На рис. 7, 8 (см. также цветную вкладку) приведены двумерные профили плотности и ионной температуры в одном из сечений, проходящих через центр капсулы, на те же моменты времени. Черная жирная линия — граница между газом и оболочкой.

Максимальное объемное сжатие в трехмерном расчете по методике МИМОЗА-НДЗД достигает $\approx 1,14 \cdot 10^3$.

На рис. 9 (см. также цветную вкладку) приведена поверхность, которая представляет собой границу между газом и оболочкой на момент

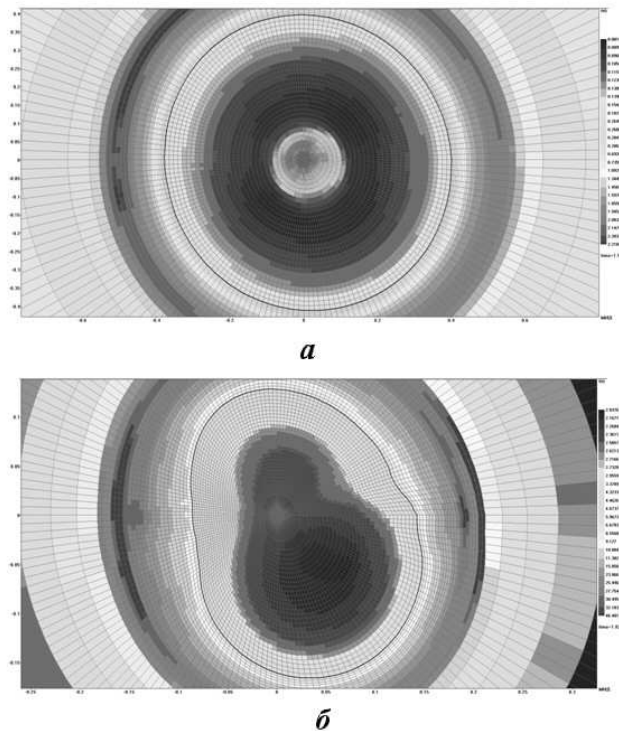


Рис. 7. Двумерные профили плотности на два момента времени: *a* — $t = 1,54$ нс; *б* — $t = 1,83$ нс

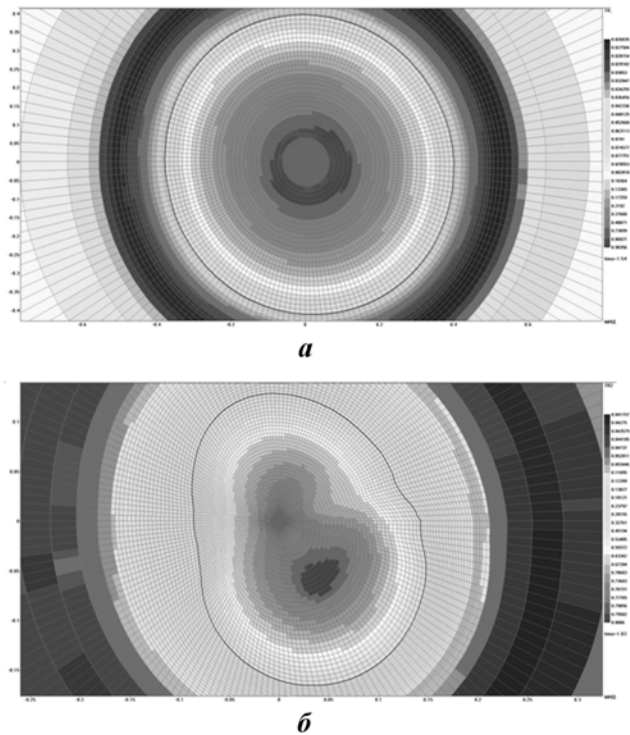


Рис. 8. Двумерные профили ионной температуры на два момента времени: *a* — $t = 1,54$ нс; *б* — $t = 1,83$ нс

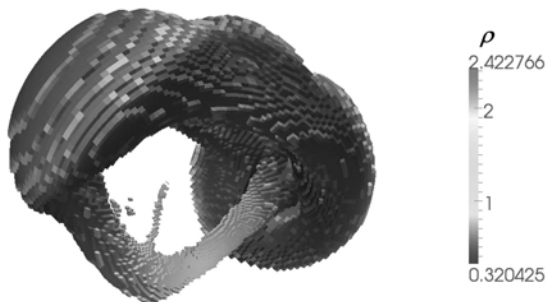


Рис. 9. Граница между газом и оболочкой на момент времени $t = 2,25$ нс

времени $t = 2,25$ нс. Как видно из этого рисунка, рост возмущений, вызванных неоднородностью рентгеновского излучения, приводит к существенным деформациям капсулы, в результате которых происходит разрыв газовой области на стадии разлета.

Заключение

Созданная методика МИМОЗА-НДЗД позволяет выполнять существенно трехмерное численное моделирование экспериментов, проводи-

мых на лазерных установках, и учитывать такие физические процессы, как поглощение и рассеяние лазерного излучения в короне, электронная и ионная теплопроводность, спектральный перенос рентгеновского излучения, термоядерные реакции, перенос энергии α -частицами, возникающими в термоядерных реакциях.

Проведен трехмерный расчет сжатия сферической стеклянной капсулы, наполненной DT-газом, под действием неоднородного по поверхности капсулы рентгеновского излучения. В трехмерном расчете нейтронный выход составил $\approx 5,1 \cdot 10^7$, тогда как в сферически-симметричном расчете $\approx 9,4 \cdot 10^7$.

Список литературы

1. Бельков С. А., Долголёва Г. В. Модель среднего иона для расчета кинетики ионизации, населенностей возбужденных уровней и спектральных коэффициентов переноса излучения в программе СНДП // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992. Вып. 1. С. 59–61.
2. Аврорин Е. Н., Зуев А. И., Лазарев Ю. Н. и др. Расчеты мишеней ЛТС по программе ЗАРЯ // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1985. Вып. 2. С. 10–20.
3. Софронов И. Д., Бельков С. А., Винокуров О. А. и др. Методика расчета спектрального переноса излучения в двумерном комплексе МИМОЗА-НД // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 1. С. 8–15.
4. More R. M., Warren K. H., Young D. A., Zimmerman G. B. Quotidian equation of state for hot dense matter // Phys. Fluids. 1988. Vol. 31. P. 3059.
5. Шагалев Р. М., Шумилин В. А., Алексеев А. В. и др. Математические модели и методики решения многомерных задач переноса частиц и энергии, реализованные в комплексе САТУРН-3 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 4. С. 20–26.
6. Ватулин В. В., Базин А. А., Беляков И. М. и др. Расчетные исследования свойств ма-

- терии в экстремальных условиях // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Т. 11. С. 6—15.
7. Бельков С. А., Бондаренко С. В., Винокуров О. А. и др. Численное моделирование по комплексу МИМОЗА-НД экспериментов со сферическим боксом, проводимых на лазерной установке ИСКРА-5 (мишень лабиринт) // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2004. Т. 6. С. 42—55.
 8. Bel'kov S. A., Mkhitarian L. S., Vinokurov O. A. et al. Study of the shell's large-scale asymmetry influence on the dynamics using the ISKRA-5 facility // Laser and Particle Beams. 1999. Vol. 17, No 3. P. 385—390.
 9. Blue B. E., Weber S. V., Glendinning S. G. et al. Experimental investigation of high-Mach-number 3D hydrodynamic jets at the National Ignition Facility // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 095005.
 10. Вершинин В. Б., Делов В. И., Софронов В. Н. Разработка и реализация в комплексе Д численного метода расчета трехмерных нестационарных упругопластических течений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 3. С. 9—24.
 11. Софронов И. Д., Афанасьева Е. А., Винокуров О. А. и др. Комплекс программ МИМОЗА для решения многомерных задач механики сплошной среды на ЭВМ Эльбрус-2 // Там же. 1990. Вып. 2. С. 3—9.
 12. Zmushko V. V. Computation of convective flows and their realization in MIMOZA code // Int. Workshop "New Models Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media". Oxford, September 15—19, 1997.
 13. Загускин В. Л. Методы расчета задач механики сплошной среды. Ростов-на-Дону: Изд-во РГУ, 1979.
 14. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
 15. Бельков С. А., Гаспарян П. Д., Кочубей Ю. К., Митрофанов Е. И. Модель среднего иона для расчета состояния многозарядной, многокомпонентной, нестационарной и неравновесной плазмы // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. С. 496—513.
 16. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др. Библиотека решателей разреженных линейных систем // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2004. Вып. 7. С. 80—95.
 17. Бондаренко С. В., Долголёва Г. В., Новикова Е. А. Численная методика расчета в секторном приближении спектрального переноса рентгеновского излучения и лазерного поглощения в боксе-конверторе рентгеновской мишени (программа СНД-ЛИРА) // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 3—4. С. 15—26.
 18. Анненков В. И., Беспалов В. И., Бредихин В. И. и др. Перевод йодного лазера "Искра-5" в режим работы на второй гармонике // Квантовая электроника. 2005. Т. 35, № 11. С. 993—995.

Статья поступила в редакцию 24.08.11.

УДК 621.039.531

ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ПРОТЕКАНИЯ ГЕЛИЯ В ПОГЛОЩАЮЩИХ ЭЛЕМЕНТАХ РЕАКТОРОВ ВВЭР

В. В. Светухин, А. С. Кадочкин, В. Д. Рисованный
(Ульяновский ГУ; ГНЦ НИИАР, г. Димитровград)

Построена теоретическая модель, описывающая протекание гелия через порошок карбида бора в поглощающем элементе атомного реактора. При помощи разработанной модели на основании экспериментальных данных исследован характер протекания гелия и определен коэффициент проницаемости порошка карбида бора в отсутствие выгорания и после эксплуатации.

Ключевые слова: карбид бора, коэффициент проницаемости, выгорание.

Введение

Реактивность ядерного реактора изменяется путем перемещения в активной зоне элементов управления цепной реакцией — регулирующих стержней цилиндрической или другой формы, материал которых содержит вещества, сильно поглощающие нейтроны. В качестве поглощающего материала в поглощающих сборках реакторов ВВЭР-1000 используется порошок карбида бора естественного изотопного состава. Его поведение при облучении в решающей степени определяет функциональную способность поглощающих элементов (пэлов) и их ресурс. Карбид бора имеет уникальные свойства: высокую эффективность поглощения нейтронов, химическую стабильность, высокую температуру плавления, низкую плотность и низкую стоимость, что обусловило широкое его использование в стержнях системы управления и защиты ядерных реакторов различного типа.

Одним из факторов, ограничивающих функциональную способность пэлов на основе виброуплотненного порошка карбида бора, является повышенное газовое давление под оболочкой вследствие интенсивного выделения гелия из частиц порошка в результате реакций (n, α) на изотопе ^{10}B [1]. При больших сроках службы пэла оно может создавать существенные напряжения в оболочке и при определенных условиях может превысить критическое значение, определяемое прочностью оболочки и внешним давлением со

стороны теплоносителя, что, в свою очередь, приведет к деформации, разрушению и заклиниванию органов регулирования в направляющих каналах.

Проблеме поведения элементов управления и защиты атомных реакторов различных типов посвящено достаточно большое количество работ. Исследуются различные факторы, влияющие на функциональную способность пэлов. Так, например, в работах [2, 3] исследованы механические свойства оболочек пэлов реакторов различных типов. Имеется ряд работ, посвященных исследованию радиационной стойкости карбида бора (см. например, [4, 5]), микроструктурных изменений [6]. Достаточно широко представлены исследования термодесорбции радиогенных газов — гелия и трития — из облученного порошка карбида бора [5, 7, 8]. В настоящее время, однако, отсутствует методика расчета распределения давления гелия под оболочкой пэлов как в номинальных, так и в аварийных режимах эксплуатации.

Одной из актуальных задач, которую необходимо решить при создании математической модели пэла, является нахождение распределения давления вышедшего под оболочку гелия, образовавшегося в процессе поглощения нейтронов, и изменение его в процессе облучения. Для решения данной задачи необходимо определить механизм просачивания гелия через порошок карбида бора, а также физические параметры, харак-

теризующие этот процесс при различных значениях выгорания. Решению данной проблемы посвящена настоящая работа.

Описание эксперимента

Для определения параметров протекания газа через порошок карбида бора в отсутствие выгорания авторами был проведен модельный эксперимент. Схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Экспериментальная установка представляла собой два баллона с манометрами, соединенных между собой трубкой с виброуплотненным порошком карбида бора. Между первым баллоном и трубкой был расположен отсечной вентиль. Трубка, моделирующая пэл, заполнена порошком карбида бора с известной насыпной плотностью. Для предотвращения попадания частиц порошка в баллоны трубка с обоих концов порошковой засыпки снабжена разделителями из никелевой сетки с очень большой газопроницаемостью, размер которых много меньше длины трубки. Воздух из баллонов и трубки с порошком откачивался с помощью форвакуумного насоса, затем баллоны заполнялись техническим гелием до различных

давлений при закрытом вентиле, после чего вентиль открывался и регистрировалась зависимость изменения давления в баллонах от времени.

К настоящему времени авторами выполнен также большой цикл работ по исследованию пэлов с порошком карбида бора реакторов ВВЭР-1000, отработавших различное время на Калининской и Балаковской АЭС (табл. 1). Накопленный опыт исследований отработавших в реакторах поглощающих стержней системы управления и защиты (ПС СУЗ) позволяет выявить основные физические процессы, происходящие в пэлах при их эксплуатации.

Исследование параметров просачивания гелия через порошок карбида бора производилось путем прокалывания оболочки пэла. Давление гелия и объем газосборника определялись манометрическим методом прокола оболочки в месте расположения газосборника пучком лазера с помощью стандартной методики. В момент прокола оболочки скачкообразно выделялось некоторое количество газа, а затем, по мере выдержки, гелий, просачиваясь через порошковый сердечник, постепенно выходил в измерительную систему, причем скорость натекания уменьшалась с течением времени. Измерения объема выделившегося при проколе оболочки гелия проводились для двух пэлов, функционирующих в режиме аварийной защиты, и трех пэлов в режиме автоматического регулирования.

Основные уравнения

Для описания просачивания газа через пористую среду применяется уравнение фильтрации Дарси, записываемое в одномерном случае в виде [9]

$$\frac{K}{\eta} \frac{\partial}{\partial x} \left[(p + b) \frac{\partial p}{\partial x} \right] + \gamma = \varphi \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (1)$$

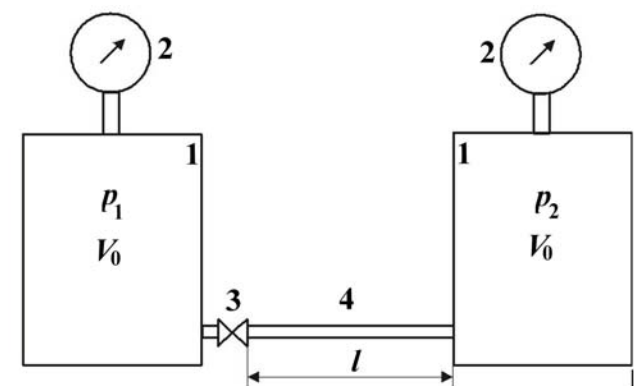


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 — баллоны объемом V_0 ; 2 — манометры ($p_1 > p_2$); 3 — клапан; 4 — трубка с порошком

Основные характеристики исследованных пэлов

Таблица 1

Характеристика пэла	Время облучения в реакторе	
	календарные сутки	эффективные сутки
АЗ Калининской АЭС	2 464	1 804
АР Балаковской АЭС	680	551

где p — давление газа; η — вязкость газа; φ — пористость порошка; K — проницаемость порошка; b — константа скольжения; $\gamma = \gamma(x, t)$ — газовыделение в единице объема в единицу времени.

В условиях рассматриваемого эксперимента выделение газа $\gamma(x, t)$ равно нулю. Кроме того, полагалось, что течение газа по трубке является вязким без скольжения, т. е. $b = 0$. В этом случае уравнение (1) упрощается и принимает вид

$$a \frac{\partial}{\partial x} \left(p \frac{\partial p}{\partial x} \right) = \varphi \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (2)$$

где $a = K/(\varphi\eta)$.

Начальное условие имеет вид $p(x, 0) = p_0$. Граничные условия определяются геометрией задачи.

В случае модельного эксперимента по прохождению гелия через трубку с порошком карбида бора граничные условия записываются как

$$\frac{\partial p}{\partial t}(0, t) = -\frac{K}{\varphi\eta l} p(0, t) \frac{\partial p(0, t)}{\partial x};$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}(l, t) = -\frac{K}{\varphi\eta l} p(l, t) \frac{\partial p(l, t)}{\partial x},$$

что отражает тот факт, что массовый расход газа через границу *баллон—трубка* зависит от объема баллона и давления в нем.

При моделировании эксперимента по проколу пэла после эксплуатации использовались граничные условия другого вида. Первое граничное условие $\frac{\partial p}{\partial x}(0, t) = 0$, что означает отсутствие течения у нижнего конца пэла. Второе граничное условие определялось из условия сохранения массы газа в замкнутом объеме:

$$\varphi S \int_0^L p(x) dx + p(L, t) = p_0 (\varphi SL + V_g),$$

где S — площадь поперечного сечения сердечника; L — длина порошкового сердечника; V_0 и V_g — объемы измерительной системы и газосборника пэла. В данном эксперименте использовались следующие значения этих величин: $S = 0,38 \text{ см}^2$; $L = 370 \text{ см}$; $V_0 = 140,23 \text{ см}^3$.

Объем $V(t)$ вышедшего газа при нормальных условиях определялся с помощью соотношения

$$\frac{p(L, t) (V_0 + V_g)}{T} = \frac{p_{\text{атм}} V(t)}{T_0},$$

где $p_{\text{атм}}$ — атмосферное давление, равное 10^5 Па , $T_0 = 273,15 \text{ К}$.

Численный расчет. Обсуждение результатов

Нелинейное дифференциальное уравнение (2) решалось численно для обоих типов граничных условий при следующих значениях входящих в него величин: $\eta = 1,95 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$; $T = 293 \text{ К}$; $\varphi = 0,305$, что соответствует средней насыпной плотности порошка карбида бора, равной $1,75 \text{ г/см}^3$. Коэффициент K проницаемости гелия определялся методом сравнения расчетных и экспериментальных данных как для модельного эксперимента по просачиванию гелия через трубку, так и для эксперимента по проколу пэла. Путем варьирования значения K добивались минимизации суммы квадратов отклонений расчетных и экспериментальных значений объема вышедшего гелия.

При моделировании эксперимента по прохождению гелия через трубку с порошком карбида бора было получено значение проницаемости $K = (3,50 \div 7,45) \cdot 10^{-14} \text{ м}^2$. Для пэлов, функционирующих в режиме аварийной защиты (табл. 2), порядок величины K составляет 10^{-14} м^2 , для пэлов в режиме автоматического регулирования — 10^{-13} м^2 . В связи с этим нужно отметить следующее. С одной стороны, порошок в процессе эксплуатации подвержен спеканию, поэтому проницаемость порошка пэлов, функционирующих в режиме автоматического регулирования и находящихся в активной зоне реактора, со временем должна уменьшаться. Пэлы, функционирующие в режиме аварийной защиты, находятся вне активной зоны реактора, поэтому порошок в них подвержен спеканию в гораздо меньшей степени и его проницаемость должна меняться значительно слабее. С другой стороны, время использования пэлов аварийной защиты (см. табл. 1) в несколько раз превышает время использования пэлов автоматического регулирования, что позволяет, по мнению авторов, сделать вывод о правдоподобности полученного результата.

Коэффициент проницаемости K можно также оценить теоретически. Согласно теории проницаемости Козени—Кармана [9]

$$K = B \frac{\varphi^3}{(1 - \varphi) S_p^2}, \quad (3)$$

где S_p — удельная поверхность порошка; B — константа Козени, принятым значением которой является $B = 0,2$ [9]. Предполагая, что части-

Результаты исследования выхода гелия после прокола оболочки

Характеристика пэла	Давление гелия в газосборнике до прокола, атм.	$K \cdot 10^{14}, \text{ м}^2$
A3 4	2,98	3,9
A3 14	2,55	3,5
AP 4	1,84	13,0
AP 9	1,62	25,0
AP 18	1,41	19,5

цы порошка имеют сферическую форму и одинаковый диаметр, равный 5 мкм [10, 11], удельную поверхность сердечника можно представить в виде

$$S_p = \frac{6(1 - \varphi)}{d}, \quad (4)$$

где d — средний диаметр частиц порошка. Тогда из (3), (4) получим

$$K = B \frac{\varphi^3 d^2}{36(1 - \varphi)^3}. \quad (5)$$

Если для оценки принять использованное значение пористости $\varphi = 0,305$, а диаметр частиц порошка $d = 10$ мкм, то для проницаемости получим значение $K = 1,2 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2$, которое по порядку величины совпадает с экспериментальным значением проницаемости, полученным для пэлов, функционировавших в режиме аварийной защиты, а также со значением проницаемости, определенным из модельного эксперимента для необлученного порошка.

На рис. 2, 3 приведены экспериментальные и расчетные зависимости, полученные для модельного эксперимента и для эксперимента по

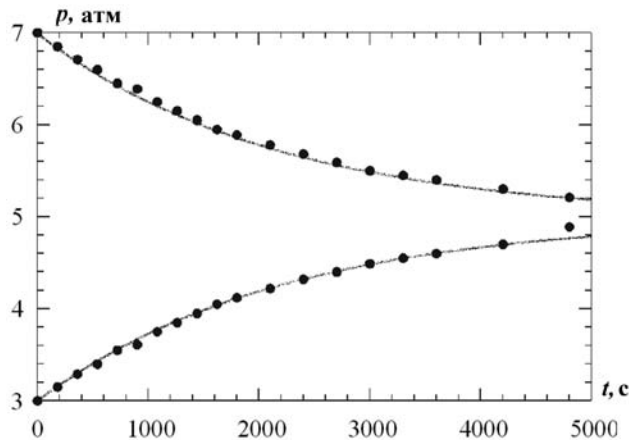


Рис. 2. Зависимость давления в баллонах (см. рис. 1) от времени: — — расчет; • — эксперимент

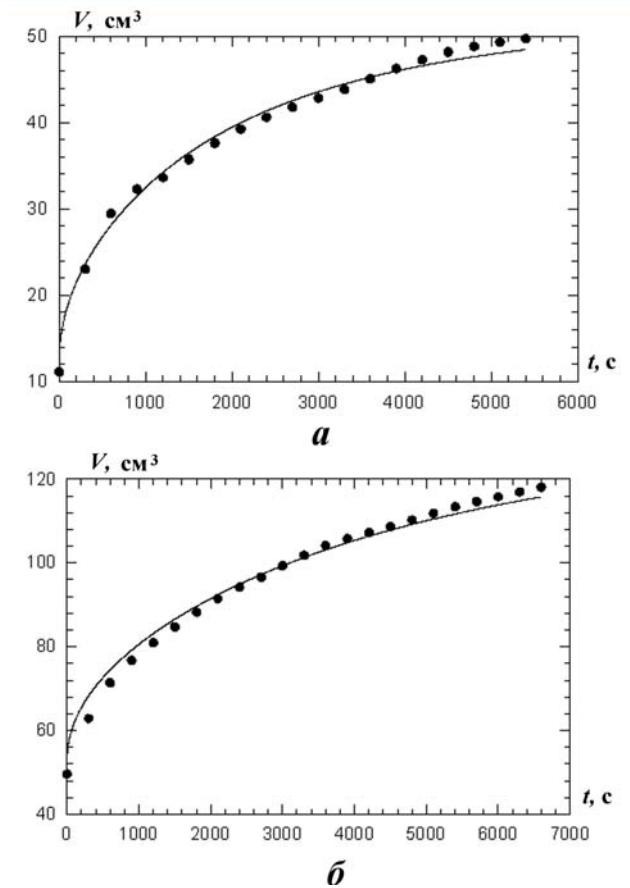


Рис. 3. Объем вышедшего газа: а — пэл AP 18; б — пэл A3 4; — — расчет; • — эксперимент

проколу оболочки пэла соответственно. Видно, что экспериментальные и расчетные зависимости совпадают с хорошей точностью: относительная погрешность во всех случаях не превышает 3—4 %.

Заключение

Таким образом, с помощью уравнения фильтрации Дарси оказалось возможным описать просачивание гелия через порошок сердеч-

ник пэла и определить газопроницаемость сердечника. При помощи численного моделирования с использованием экспериментальных данных была определена проницаемость порошка карбида бора при отсутствии выгорания (модельный эксперимент), а также для пэлов, функционирующих в режимах автоматического регулирования и аварийной защиты. Было показано, что протекание гелия через порошок карбида бора является преимущественно вязким, а ролью других механизмов можно пренебречь. Следует отметить, что значения проницаемости K , полученные при моделировании двух независимых экспериментов, совпадают по порядку величины как между собой, так и с теоретической оценкой, полученной из теории Козени—Кармана. Это позволяет считать полученные значения проницаемости достаточно надежными.

Работа поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации.

Список литературы

1. *Zaharov A. V., Risovaniy V. D., Fridman S. R. et al.* Irradiation behavior of boron carbide reactors WWER-1000 // Proc. of Technical Committee Meeting "Control Assembly Materials for Water Reactors: Experience, Performance and Perspectives". 1998. Vienna: IAEA, 2000. TECDOC-1132. P. 167—174.
2. *Massih A. R., Isaksson P., Ståhle P.* Modelling the behaviour of a control-element blade during irradiation // Computers and Structures. 1997. Vol. 64, No 5—6. P. 1113—1127.
3. *Рисованный В. Д., Захаров А. В., Ключков Е. П., Гусева Т. М.* Бор в ядерной технике. Димитровград: ФГУП ГНЦ РФ НИИАР, 2003.
4. *Климов В. Д., Тарасиков В. П.* Влияние облучения на структуру карбида бора. Обнинск: ФЭИ, 1983.
5. *Suzuki H., Maruyama I., Wakasa T.* Postirradiated annealing of boron carbide pellet irradiated in fast breeder reactor // J. Nucl. Sci. Tech. 1979. Vol. 16. P. 588—589.
6. *Kryger B., Chotard A., Herter P.* Behavior of PWR type B₄C irradiated at high capture rate // Proc. of Technical Committee Meeting "Advances in Control Assembly Materials for Water Reactors". Vienna, 29 November — 2 December, 1993, Vienna: IAEA, 1996. TECDOC-813. P. 37—49.
7. *Ковыркин В. Г.* Выделение гелия при нагреве облученного карбида бора // Атомная энергия. 1982. Т. 53. Вып. 2. С. 112—113.
8. *Schnarr K., Münzel H.* Release of tritium from boron carbide irradiated with reactor neutrons // J. Nucl. Mat. 1990. Vol. 170 (3). P. 253—260.
9. *Шейдеггер А. Э.* Физика течения жидкостей через пористые среды. М.: Государственное научно-техническое издательство нефтяной и горно-топливной литературы, 1960.
10. *Tanaka K., Suzuki M., Kojima M., Akimoto Y.* Preparation of B₄C compact // Summary Report Meeting of Specialists on Development and Application of Absorber Materials. Dimitrovgrad: RIAR, 1973. P. 159—176.
11. *Остапенко И. Т., Слёзов В. В., Тарасов Р. В. и др.* Уплотнение карбида бора при горячем прессовании // Порошковая металлургия. 1979. № 5. С. 38—43.

Статья поступила в редакцию 15.08.11.

УДК 681.324

УНИВЕРСАЛЬНАЯ КОМПАКТНАЯ СуперЭВМ

Ю. Г. Бартенев, В. Г. Басалов, А. М. Варгин, В. М. Вялухин, Н. А. Дмитриев,
Д. А. Жуков, В. И. Игрунов, Ю. Н. Корзаков, В. В. Кошелев, В. Н. Лашманов,
Ю. В. Логвин, А. Н. Петрик, А. Г. Селякин, Г. П. Семёнов, В. Н. Стрюков,
А. Ю. Ушаков, А. И. Чайка, С. О. Черных, Р. М. Шагалиев, А. В. Шатохин,
С. Н. Шлыков, Е. Л. Шмаков, Д. Р. Ярулин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Статья посвящена разработке в РФЯЦ-ВНИИЭФ универсальной компактной супер-ЭВМ с терафлопсной производительностью (один триллион операций с плавающей точкой с двойной точностью в секунду). Такая суперЭВМ позиционируется как повседневный инструмент конструктора, технолога или исследователя для высокопроизводительных вычислений. Несмотря на свои небольшие для суперкомпьютера габариты, по производительности данная суперЭВМ сопоставима с 40 современными персональными компьютерами.

Ключевые слова: компактная суперЭВМ, высокопроизводительные вычисления, воздушно-жидкостная система охлаждения, программно-аппаратный мониторинг аппаратных и программных компонентов, бескоммутаторная среда межпроцессорного обмена.

Введение

Создание высокотехнологичных изделий требует выполнения опытно-конструкторских работ (ОКР), традиционно проводимых с применением дорогостоящих натуральных экспериментов. Альтернативой является численное моделирование на ЭВМ. Наблюдается постоянное увеличение значимости численного моделирования в ОКР, связанное с тем, что оно обладает большим спектром преимуществ, недоступных при экспериментах, таких как существенное снижение расходов, сроков проведения ОКР и более полная отработка разрабатываемых изделий. Все это привело к росту спроса на ЭВМ различного класса — от настольных до суперЭВМ. Анализ научно-технических проблем выявил, что для удовлетворения потребностей многих промышленных и научных организаций, КБ, НИИ наиболее оптимальным вариантом являются компактные суперЭВМ (КС-ЭВМ), разработке которых посвящена данная статья.

Во ВНИИЭФ с 2009 г. начата разработка КС-ЭВМ, как универсальных, так и специализированных (гибридных).

КС-ЭВМ — это суперкомпьютеры офисного применения с терафлопсной производительностью, которые предназначены для того, чтобы стать повседневным инструментом исследователей, конструкторов и технологов. КС-ЭВМ не требует отдельного помещения, дорогостоящих специальных инженерных систем (системы охлаждения, электропитания и пр.), дополнительного обслуживающего персонала и устанавливается на рабочем месте пользователя.

Концепция персонального суперкомпьютера, каким является и КС-ЭВМ, развивается с 2005 г., и в настоящее время на рынке представлены разнообразные модели от различных производителей, включая отечественных. К ним относятся персональные суперкомпьютеры CX1 американской фирмы Cray [1], разработка ИПС РАН "СКИФ-Аврора" [2], а также компактный суперкомпьютер T-Edge компании "Т-Платформа" [3]. Данные решения уступают описываемой в статье КС-ЭВМ по максимальной производительности или обладают более высоким уровнем акустического шума. Кроме того, для функционирования некоторых из них требуются

ются инфраструктурные компоненты, такие как дополнительные преобразователи электропитания $\sim 220\text{ В} \rightarrow +48\text{ В}$ и внешние (выносные) компоненты системы жидкостного охлаждения (СЖО).

В 2009 г. во ВНИИЭФ был создан прототип КС-ЭВМ (рис. 1), который, как и вышеперечисленные системы, был построен по модульному принципу. В процессе разработки выяснилось, что такой подход продиктовал ряд серьезных ограничений, в силу которых прототип не в полной мере отвечал предъявляемым к персональным суперкомпьютерам требованиям, таким как габариты и уровень шума.

В 2010 г. создан опытный образец КС-ЭВМ, в котором устранены выявленные в прототипе недостатки. КС-ЭВМ разработки РФЯЦ-ВНИИЭФ 2010 г. [4] — это компактная универсальная вычислительная многопроцессорная ЭВМ, оснащенная базовым системным и прикладным программным обеспечением (ПО), в том числе разработанным в РФЯЦ-ВНИИЭФ. КС-ЭВМ имеет кластерную MIMD-архитектуру, высокопроизводительную систему межпроцессорных обменов, процессоры, поддерживающие систему команд x86.

КС-ЭВМ ориентирована на решение задач трехмерного имитационного моделирования с целью повышения точности, уменьшения сроков инженерных расчетов при проектировании и создании новых образцов техники на предприятиях высокотехнологичных областей.



Рис. 1. Прототип КС-ЭВМ

КС-ЭВМ обеспечивает разработку, отладку и исполнение приложений, написанных на языках C, C++, Fortran-90, использующих средства MPI, OpenMP, в последовательном, параллельном, одно- и многопользовательском режимах.

КС-ЭВМ имеет автономную систему охлаждения, создаваемый ею акустический шум не превышает допустимых санитарно-гигиенических норм. Это позволяет устанавливать ее в одном помещении с рабочим местом пользователя.

Общее описание КС-ЭВМ разработки РФЯЦ-ВНИИЭФ

КС-ЭВМ состоит из следующих компонентов:

- вычислительная подсистема;
- высокоскоростная коммуникационная среда;
- дисковая подсистема;
- подсистема охлаждения;
- подсистема электропитания;
- сервисная подсистема;
- системное ПО.

Основные технические характеристики КС-ЭВМ приведены в табл. 1.

Аппаратная платформа вычислительной подсистемы КС-ЭВМ построена на самых современных (на момент ее создания) многоядерных микропроцессорах фирмы AMD, размещенных в трех серверных платах, объединенных между собой двумя высокоскоростными коммуникационными сетями с использованием технологий InfiniBand QDR и Gigabit Ethernet. Основными параметрами выбора микропроцессоров стали производительность и энергоэффективность.

Разработана специализированная система мониторинга, позволяющая контролировать наиболее важные параметры работы КС-ЭВМ, такие как температура, загрузка процессоров, обороты датчика потока жидкости в контуре СЖО, емкость используемой оперативной памяти и пр. Все эти параметры контролируются с помощью сервисной подсистемы на базе внутреннего сервисного модуля и программных решений РФЯЦ-ВНИИЭФ с использованием Web-интерфейса.

Все аппаратные подсистемы КС-ЭВМ размещаются в компактном корпусе с габаритными размерами $650 \times 320 \times 725$ мм, разработанном и изготовленном в РФЯЦ-ВНИИЭФ (рис. 2). Электропитание КС-ЭВМ осуществляется от однофазной сети переменного тока напряжением

Технические характеристики КС-ЭВМ

Характеристика	Значение
Теоретическая пиковая производительность	1,1 Тфлоп/с
Количество вычислительных ядер	144
Максимальная емкость оперативной памяти	до 1 536 Гбайт
Максимальная емкость дисковой памяти	до 24 Тбайт
Операционная система	Linux
Акустический уровень шума	48 дБА
Габариты (высота × ширина × глубина)	645 × 320 × 725 мм
Масса	60 кг
Количество системных плат и процессоров на плате	3/4
Система охлаждения процессоров	Жидкостная
Система межпроцессорных обменов	InfiniBand QDR
Сеть управления и мониторинга	Ethernet
Подключение к локальной сети предприятия	Gigabit Ethernet
Система шумоподавления	Пассивная
Электропитание	220 В, 50 Гц
Максимальная потребляемая мощность	2,5 кВт



Рис. 2. КС-ЭВМ

220 В и частотой 50 Гц с заземленной нейтралью (от обычной офисной электрической розетки).

Для снижения акустического шума до приемлемого уровня используется воздушно-жидкостная система охлаждения.

В ходе разработки КС-ЭВМ применены технические решения, связанные с реализацией высокоскоростной коммуникационной среды InfiniBand по бескоммутаторной схеме и СЖО процессоров КС-ЭВМ. Это позволило существенно сократить потребляемую мощность КС-ЭВМ, снизить уровень акустического шума и расширить температурный диапазон использования КС-ЭВМ в помещении.

В КС-ЭВМ используется свободно-распространяемое системное ПО, а также ПО разработки РФЯЦ-ВНИИЭФ, как системное, так и прикладное.

В настоящее время в РФЯЦ-ВНИИЭФ развернуто мелкосерийное производство КС-ЭВМ и ведутся их поставки предприятиям ведущих отраслей промышленности Российской Федерации.

Функциональная схема КС-ЭВМ

В результате тщательного анализа рынка и тенденций развития современных высокопроизводительных мультипроцессорных систем авторами КС-ЭВМ были выработаны технические решения, рассмотрение которых целесообразно начать с функциональной схемы, содержащей следующие элементы (рис. 3):

- блоки питания, 220 В, 50 Гц — 3 (БП1–БП3);
- вычислительные модули — 3 (ВМ1–ВМ3);
- сервисный модуль сети мониторинга — 1 (СМ);
- коммутатор сети управления — 1 (К);
- блок питания сервисного модуля и коммутатора, 220 В, 50 Гц — 1 (БП4);
- распределительная коробка питания — 1 (РКП);
- каналы управляющей сети — 4 (обозначены сплошной тонкой линией);
- каналы коммуникационной сети — 3 (обозначены сплошной жирной линией);
- каналы электропитания — 6 (обозначены пунктирной линией).

Данная схема приводится в описании полезной модели [5].

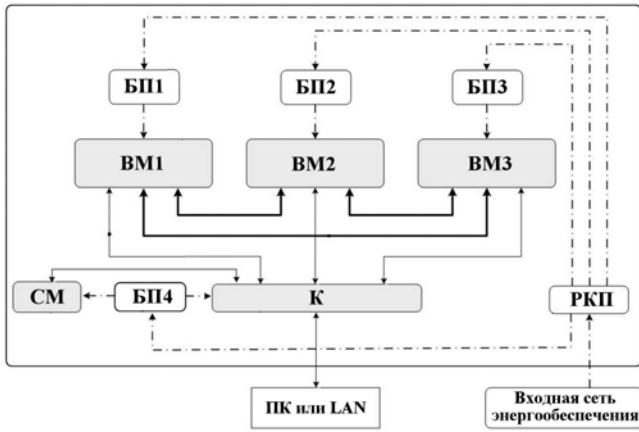


Рис. 3. Функциональная схема КС-ЭВМ

Цель создания КС-ЭВМ — получение максимальной производительности на широком классе задач с обеспечением эксплуатационных характеристик персонального компьютера и высокой надежности при минимальном физическом объеме. Достижение этой цели зависит от компонентов вычислительной подсистемы, их количества, размещения внутри корпуса, способов их охлаждения, электропитания, коммутации, а также системы мониторинга функционирования аппаратно-программных компонентов и обработки аварийных ситуаций.

Конструктивные особенности КС-ЭВМ

Для размещения оборудования КС-ЭВМ разработан специальный корпус. На рис. 4 представлен корпус КС-ЭВМ. Как видно из рисунка, корпус имеет два функционально различных

отсека. Нижний отсек содержит три системные платы, жесткие диски и радиаторы СЖО. Верхний отсек включает в себя блоки питания, устройства ввода-вывода, сервисный модуль и расширительный бак СЖО.

Для удобства обслуживания КС-ЭВМ все стенки корпуса являются съемными.

Вычислительная подсистема

Суммарная пиковая производительность процессоров КС-ЭВМ составляет 1,1 Тфлоп/с. Основные технические характеристики вычислительной подсистемы КС-ЭВМ представлены в табл. 2.

Основным базовым элементом любой вычислительной машины является центральный процессор. От выбора процессора зависят эксплуатационные характеристики и технические решения, применяемые в вычислительной машине. Поиск компонентной базы основывался на следующих выстроенных по приоритету характеристиках:

- 1) суммарная теоретическая пиковая производительность (должна быть не менее 1 Тфлоп/с);
- 2) тепловыделение — параметр, влияющий на габариты системы охлаждения и уровень шума при рассеивании тепла;
- 3) удельное потребление электроэнергии (кВт/(Тфлоп/с)) — параметр, влияющий на характеристики системы электропитания;
- 4) совместимость процессоров КС-ЭВМ с архитектурой (вследствие этого использова-

Таблица 2

Основные технические характеристики вычислительной подсистемы КС-ЭВМ

Характеристика	Значение
Процессор	AMD MagnyCourse
Тактовая частота процессора	1,9 ГГц
Максимальное количество операций за такт	4
Количество ядер в процессоре	12
Потребляемая мощность процессора	75 Вт
Количество ВМ в КС-ЭВМ	3
Количество процессоров в ВМ	4

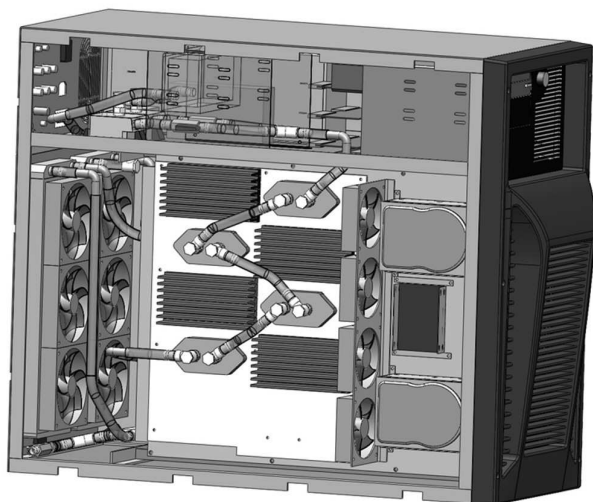


Рис. 4. Размещение компонентов КС-ЭВМ

ние ускорителей или, например, процессоров IBM Power не рассматривалось).

Производительность одного процессора является определяющим фактором в расчете общего количества используемых в КС-ЭВМ процессоров, количества и типа используемых системных плат:

$$P_{CPU} = fTK_{core}, \quad (1)$$

где P_{CPU} — производительность одного процессора; f — тактовая частота процессора; T — количество операций за один такт; K_{core} — количество ядер в одном процессоре.

Процессор Magny-Cours (1,9 ГГц) производства фирмы AMD в составе трех четырехпроцессорных системных плат позволяет достигнуть требуемой суммарной теоретической пиковой производительности. Исходя из формулы (1) теоретическая пиковая производительность одного процессора КС-ЭВМ достигает 91,2 Гфлоп/с (1,9 ГГц \times 4 опер. за такт \times 12 ядер). Поскольку

$$P_{КС-ЭВМ} = K_{CPU} \cdot P_{CPU},$$

где $P_{КС-ЭВМ}$ — производительность КС-ЭВМ; P_{CPU} — производительность одного процессора; K_{CPU} — количество процессоров в составе КС-ЭВМ, то теоретическая пиковая производительность всей КС-ЭВМ на процессоре Magny-Cours 1,9 ГГц достигает 1,094 Тфлоп/с (12 CPU \times 91,2 Гфлоп/с).

Коммуникационная подсистема

На текущий момент InfiniBand — лидирующая технология межпроцессорного взаимодействия высокопроизводительных вычислительных модулей. Коммуникационная среда InfiniBand строится на базе:

- коммуникационного адаптера (HCA);
- InfiniBand-кабеля;
- InfiniBand-коммутатора.

КС-ЭВМ содержит три вычислительных модуля, для объединения которых посредством коммутатора необходимо три InfiniBand-порта. Применение InfiniBand QDR-коммутатора с минимальным на момент разработки КС-ЭВМ количеством портов, равным 36, в коммуникационной среде КС-ЭВМ приводит к простаиванию 33 портов. При этом заметно увеличивается конечная цена изделия, а также общий уровень электропотребления и шума.

В качестве коммуникационной среды межпроцессорного обмена КС-ЭВМ выбрана технология InfiniBand с подключением вычислительных модулей по схеме "каждый с каждым". Для поддержки этой технологии разработано в РФЯЦ-ВНИИЭФ [6]. Функциональная способность такой коммуникационной среды была проверена на тестах, проводимых в рамках Государственных испытаний, а также тестах NAS NPВ, HPL, SPPM и прикладных программных комплексах, разработанных в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Подсистема охлаждения

Для снижения уровня акустического шума КС-ЭВМ до санитарно-гигиенических норм используется воздушно-жидкостная система охлаждения.

Все компоненты КС-ЭВМ, кроме микропроцессоров, охлаждаются потоком воздуха. Для воздушного охлаждения установлены вентиляторы, по четыре на каждую системную плату (рис. 5).

Тепло от микропроцессоров отводится жидкостью.

СЖО КС-ЭВМ. СЖО является одноконтурной (рис. 6). Под действием давления, создаваемого водяной помпой (П1, П2), жидкость последовательно проходит через водоблоки каждого из процессоров (ВВ1–ВВ12), нагреваясь и

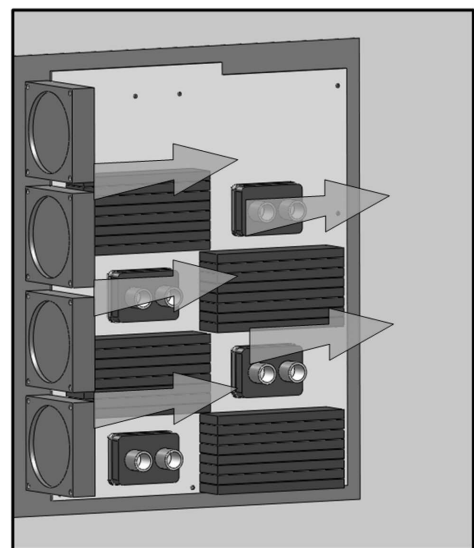


Рис. 5. Воздушное охлаждение системных плат КС-ЭВМ

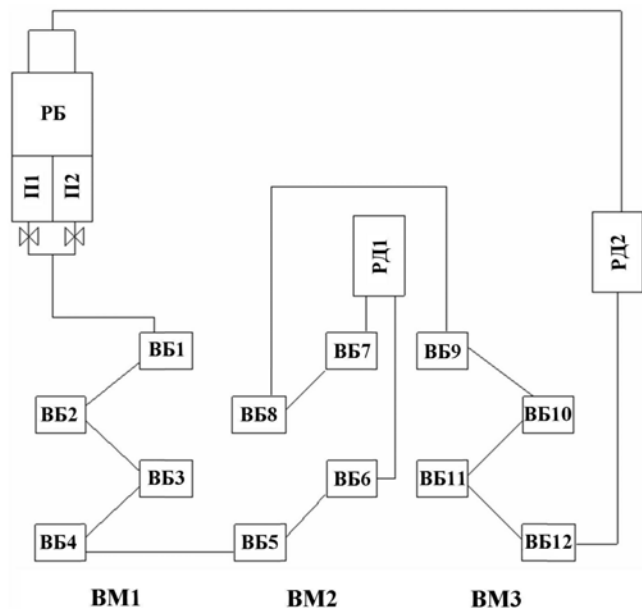


Рис. 6. Схема СЖО КС-ЭВМ

тем самым отбирая тепловую энергию. Для оптимального охлаждения процессоров в контур включено два радиатора (РД1, РД2) — один в середине и один в конце контура охлаждения, при помощи которых и происходит отвод тепла.

В процессе разработки контура охлаждения КС-ЭВМ авторы столкнулись с проблемой, связанной со спецификой жидкостного охлаждения персонального суперкомпьютера. Контур такой СЖО должен быть герметичен. Это необходимо, чтобы обеспечить пылезащищенность жидкости в системе охлаждения и предотвратить разлив жидкости при перемещениях КС-ЭВМ. Отрицательным моментом герметичного контура стали температурные перепады, вызывающие изменение объема жидкости и, как следствие, перепады давления внутри контура охлаждения. Для стабилизации давления внутри замкнутого контура СЖО на уровне атмосферного был разработан компенсатор, который представляет собой гибкую мембрану в виде вмонтированного в расширительный бак (РБ на рис. 6) гофрированного стакана из резины, изменяющего замкнутый объем расширительного бака (рис. 7) (получен патент на полезную модель [7]).

Расчет параметров гибкой мембраны контура СЖО. Схема контура охлаждения с резервуаром, имеющим переменный объем, представлена на рис. 8.

Расчет объема гибкой мембраны компенсатора производится по формуле

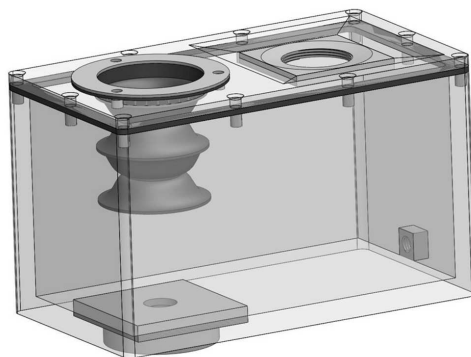


Рис. 7. Расширительный бак СЖО

$$V_{\text{комп}} = (V_{\text{ж_расш}} + V_{\text{в_расш}}) - (V_{\text{ж_исх}} + V_{\text{в_исх}}), \quad (2)$$

где $V_{\text{комп}}$ — объем гибкой мембраны компенсатора; $V_{\text{ж_исх}}$ — объем воды в охлаждающем контуре; $V_{\text{в_исх}}$ — объем воздуха в расширительном баке в исходном состоянии; $V_{\text{ж_расш}}$ — объем воды в контуре охлаждения после теплового расширения; $V_{\text{в_расш}}$ — объем воздуха в расширительном баке после теплового расширения при условии, что его давление остается неизменным.

Высота гофрированного компенсатора вычисляется по формуле

$$H_{\text{комп}} \geq \frac{V_{\text{комп}}}{S_{\text{комп}}}, \quad (3)$$

где $H_{\text{комп}}$ — высота гибкой мембраны компенсатора; $S_{\text{комп}}$ — площадь дна гибкой мембраны компенсатора.

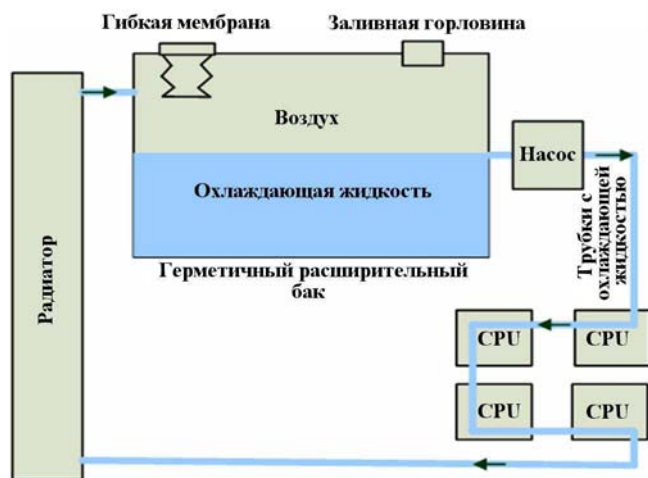


Рис. 8. Контур охлаждения и резервуар с переменным объемом

Исходя из известных параметров СЖО $V_{ж_исх} = 1500 \text{ см}^3$; $V_{в_исх} = 200 \text{ см}^3$; $V_{бака} = 500 \text{ см}^3$; $S_{комп} = 12 \text{ см}^2$, необходимо определить $V_{ж_расш}$, $V_{в_расш}$, $V_{комп}$, $H_{комп}$.

$V_{ж_расш}$ находится из коэффициента расширения жидкости, который изменяется в зависимости от температуры (табл. 3). Наиболее интересны две температурные границы, соответствующие стандартному режиму работы (40–60 °С) и аварийному режиму (70–80 °С – граница срабатывания тепловой защиты системной платы).

$V_{в_расш}$ находится из коэффициента расширения воздуха, который на интервале от 0 до 100 °С практически не изменяется. Средний коэффициент теплового расширения воздуха от 0 до 100 °С равен $0,00367 \text{ К}^{-1}$ (из справочных данных).

Зная коэффициенты объемного расширения жидкости и воздуха, рассчитываем объем жидкости и воздуха:

– для стандартного режима

$$V_{ж_расш} = 1513,74 \text{ см}^3;$$

$$V_{в_расш} = 229,36 \text{ см}^3;$$

– для аварийного режима

$$V_{ж_расш} = 1548,96 \text{ см}^3;$$

$$V_{в_расш} = 258,72 \text{ см}^3.$$

Зная разницу между исходным и расширенным объемами воздуха и жидкости, вычисляем объем компенсатора (2) и высоту гибкой мембраны компенсатора (3):

– для стандартного режима

$$V_{комп} = 43,10 \text{ см}^3; H_{комп} = 3,59 \text{ см};$$

Таблица 3

Коэффициенты объемного расширения (k) используемой жидкости

$T, \text{ }^\circ\text{C}$	$k, \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$
5–10	$5,30 \cdot 10^{-5}$
10–20	$1,50 \cdot 10^{-4}$
20–40	$3,02 \cdot 10^{-4}$
40–60	$4,58 \cdot 10^{-4}$
60–80	$5,87 \cdot 10^{-4}$

– для аварийного режима

$$V_{комп} = 107,68 \text{ см}^3; H_{комп} = 8,97 \text{ см}.$$

Если система охлаждения КС-ЭВМ по каким-либо причинам не выполняет своих функций, экстренное выключение организуется системой мониторинга КС-ЭВМ и на аппаратном уровне (системной платой). Порог отключения можно установить как в системе мониторинга КС-ЭВМ, так и в настройках BIOS системных плат.

Проверка системы охлаждения проводилась при максимальной загрузке всех ядер процессоров и всей оперативной памяти. Данные о температуре фиксировались с помощью датчиков, встроенных в системную плату, а также велась съемка тепловизором. В результате авторам удалось рассчитать и обеспечить на практике эффективный отвод тепла от всех процессоров КС-ЭВМ независимо от того, в какой части контура водяного охлаждения они находятся. Также была решена задача охлаждения оперативной памяти и чипсетов системных плат.

Подсистема электропитания

Как указано выше, электропитание КС-ЭВМ осуществляется от обычной офисной электрической розетки. Подсистема электропитания через распределительный блок (БР) снабжает электроэнергией следующие компоненты (рис. 9):

- три вычислительных модуля (ВМ);
- набор жестких дисков;
- Ethernet-коммутатор (К);
- сервисный модуль (СМ);
- два насоса системы водяного охлаждения (П);
- вентиляторы воздушного охлаждения.

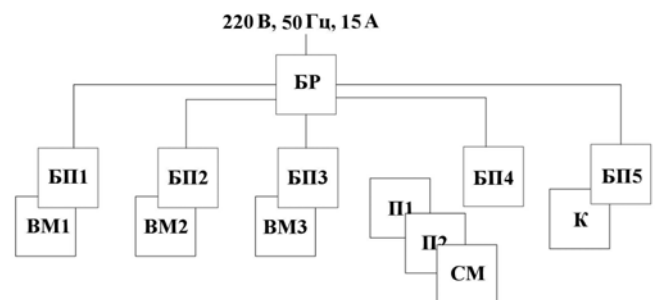


Рис. 9. Подсистема электропитания КС-ЭВМ

Как видно из рис. 9, в состав подсистемы электропитания КС-ЭВМ входят пять блоков питания (БП), которые обеспечивают функционирование вычислительных модулей, сервисного модуля и вспомогательных подсистем КС-ЭВМ.

Для питания вычислительных модулей используются малошумные АТХ-блоки питания. Питание жидкостных помп и сервисного модуля КС-ЭВМ обеспечивается маломощным блоком питания отечественного производства. Коммутатор Gigabit Ethernet имеет отдельный блок питания.

Использование данного технического решения в совокупности с гибридной системой охлаждения КС-ЭВМ позволило добиться низкого уровня акустического шума и дало возможность подключения КС-ЭВМ к обычной офисной розетке.

Сервисная подсистема КС-ЭВМ

Сервисная подсистема КС-ЭВМ — программно-аппаратный блок, включающий в себя сервисный модуль, коммутатор Gigabit Ethernet, датчик потока жидкости СЖО и специализированную систему мониторинга [8]. На рис. 10 представлена структура сервисной подсистемы КС-ЭВМ.

Сервисный модуль является головным устройством сервисной подсистемы КС-ЭВМ, которое реализовано с использованием малогабаритной системной платы в комплектации с одним модулем памяти 2 Гбайт. Сервисный модуль оборудован SATA-диском емкостью 500 Гбайт.

Сбор контролируемых параметров осуществляется сервисным модулем посредством 5-портового коммутатора Gigabit Ethernet. Интегрированный порт Gigabit Ethernet сервисного модуля, а также порты LAN1 каждого из вычислительных модулей подключены к этому коммутатору.

Параметры состояния подсистем КС-ЭВМ поступают с датчиков, условно разделяемых:

- на сенсоры материнских плат, опрашиваемые интегрированным в состав плат BMC-контроллером (аппаратные датчики);
- программные датчики, содержащие сведения из ядра ОС Linux о состоянии ресурсов аппаратуры.

BMC-контроллеры материнских плат опрашиваются системой мониторинга посредством сетевого протокола IPMI. Параметры состояния



Рис. 10. Структура сервисной подсистемы КС-ЭВМ

ресурсов аппаратуры обрабатываются специальными службами, представляющими собой отдельные компоненты программной части сервисной подсистемы и функционирующими на вычислительных модулях (см. рис. 10).

Для организации внешних подключений к сервисному модулю в состав КС-ЭВМ включен дополнительный USB-Ethernet-адаптер, порт которого выведен на заднюю панель корпуса КС-ЭВМ.

Электропитание сервисного модуля и коммутатора Gigabit Ethernet осуществляется независимо от вычислительных модулей блоками питания. Работа сервисного модуля, помп СЖО, датчика потока и коммутатора начинается сразу после включения тумблера входного питания КС-ЭВМ, что обеспечивает готовность сервисной подсистемы к работе до включения материнских плат вычислительных модулей.

ПО сервисного модуля состоит из специально подготовленного дистрибутива операционной системы Linux Gentoo, оптимизированного специалистами РФЯЦ-ВНИИЭФ для надежной работы системы мониторинга. Основными программными

ми компонентами ОС сервисного модуля, необходимыми для работы системы мониторинга, являются:

- пакеты `freeipmi` и `ipmitool` для организации IPMI-опросов BMC-контроллеров материнских плат вычислительных модулей КС-ЭВМ;
- HTTP-сервер Apache для организации WEB-интерфейса системы мониторинга;
- интерпретатор языка Perl;
- скрипты системы мониторинга, выполняемые сервисным модулем, включая CGI-скрипты WEB-интерфейса, реализованные на языке Perl;
- пакет `RRDtool` для организации циклического хранения статистической информации о значениях параметров работы КС-ЭВМ;
- пакет `lm_sensors` для контроля датчика потока жидкости, подключенного непосредственно к материнской плате сервисного модуля.

Система мониторинга полностью является разработкой РФЯЦ-ВНИИЭФ и осуществляет контроль следующих параметров:

- температуры процессоров и системных плат;
- скорости потока жидкости СЖО;
- номиналов питающих напряжений;
- скорости вращения вентиляторов;
- состояния сетевых интерфейсов Ethernet и InfiniBand;
- состояния жестких дисков (SMART);
- загрузки центральных процессоров и использования оперативной памяти вычислительных модулей;
- активности пользователей.

Оперативные и статистические данные по контролируемым параметрам, а также возможность удаленного управления сервисная подсистема КС-ЭВМ предоставляет посредством WEB-интерфейса. На рис. 11–13 показаны примеры некоторых страниц WEB-интерфейса системы мониторинга КС-ЭВМ.

В разделе "Датчики" системы мониторинга (см. рис. 11) отображаются температуры процессоров, плат, номиналы питающих напряжений и показания датчика потока охлаждающей жидкости.

В разделе "Сводка" системы мониторинга (см. рис. 12) отображаются сведения о зафиксированных отклонениях в работе подсистем КС-ЭВМ.

"Журнал" — раздел WEB-интерфейса системы мониторинга (см. рис. 13), отображающий события, происходящие с аппаратурой и программной составляющей КС-ЭВМ в рамках охватываемых системой мониторинга параметров.

ПО КС-ЭВМ

ПО КС-ЭВМ предназначено для создания вычислительной среды, обеспечивающей разработку, отладку и выполнение последовательных и параллельных приложений, управление заданиями и ресурсами, управление доступом и хранением данных, мониторинг аппаратно-программных компонентов, сбор и обработку информации об использовании вычислительных ресурсов и эффективности выполнения параллельных приложений, визуализацию и графический анализ данных для задач математического моделирования.

ПО, устанавливаемое на КС-ЭВМ, применимо как в среде бескоммутаторной топологии высокопроизводительной сети InfiniBand, так и в среде классической реализации топологии InfiniBand с использованием коммутатора.

Базовой операционной системой (ОС) для КС-ЭВМ выбрана ОС с открытым кодом Scientific Linux, программно совместимая с одним из наиболее распространенных дистрибутивов Linux RedHat. Она обеспечивает эффективное использование вычислительных ресурсов КС-ЭВМ в мультизадачном и многопользовательском режимах.

Для повышения эффективности эксплуатации КС-ЭВМ оснащена следующими программными компонентами разработки РФЯЦ-ВНИИЭФ:

- система инсталляции и настройки системного ПО OSTOPUS. Предназначена для автоматической установки и настройки необходимого системного и прикладного ПО на многопроцессорных вычислительных системах;
- система пакетного запуска параллельных приложений JAM. В системе JAM реализованы наиболее полезные функции ее аналогов (PBS, LoadLeveler, SLURM, Condor и т. д.), она ориентирована на полноценный

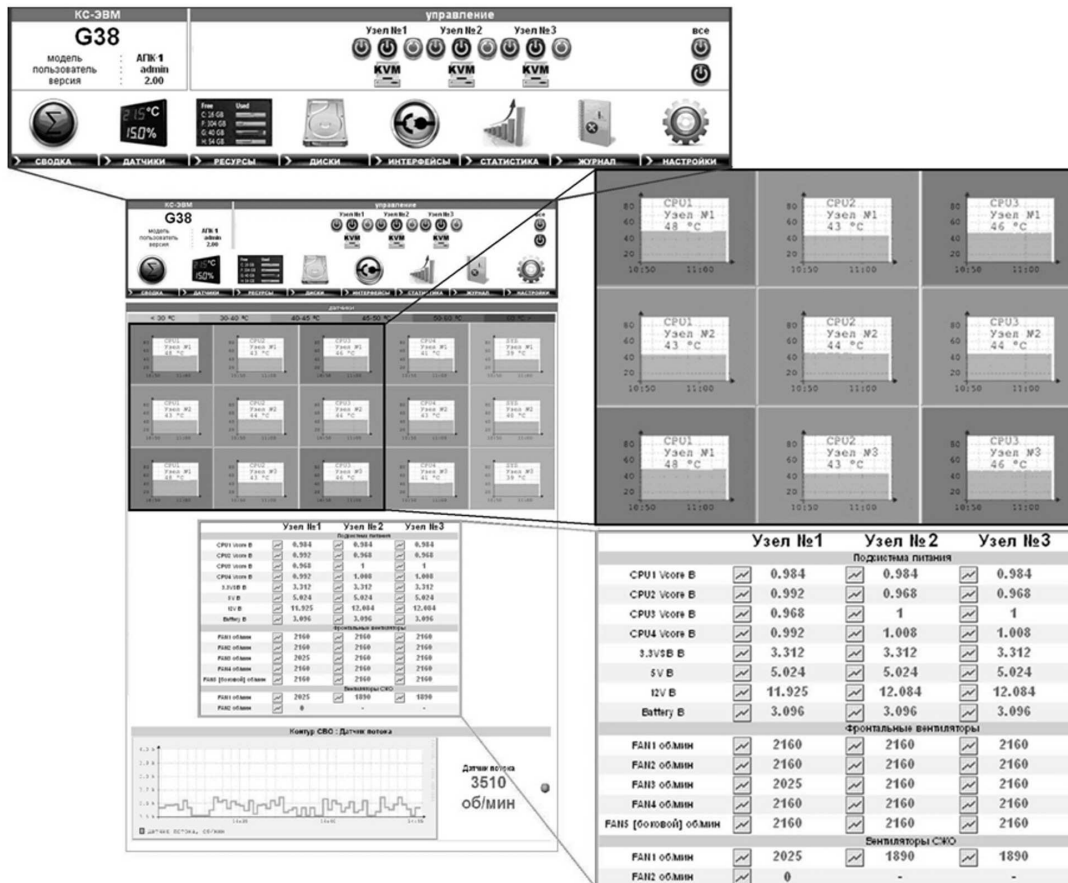


Рис. 11. Раздел "Датчики" WEB-интерфейса системы мониторинга

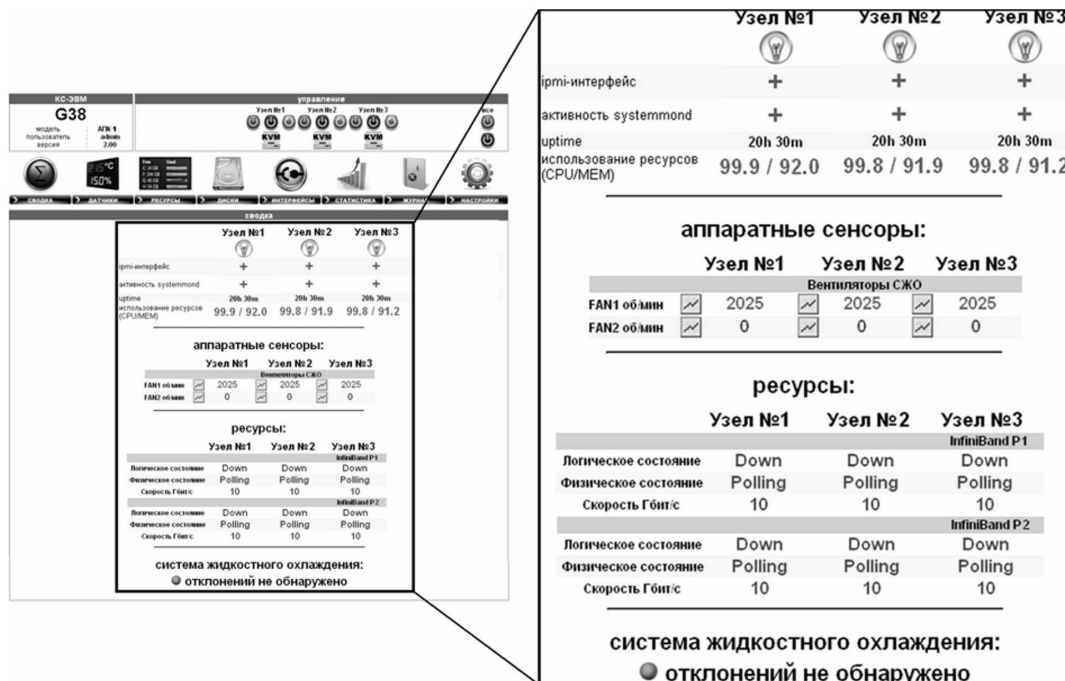


Рис. 12. Раздел "Сводка" WEB-интерфейса системы мониторинга

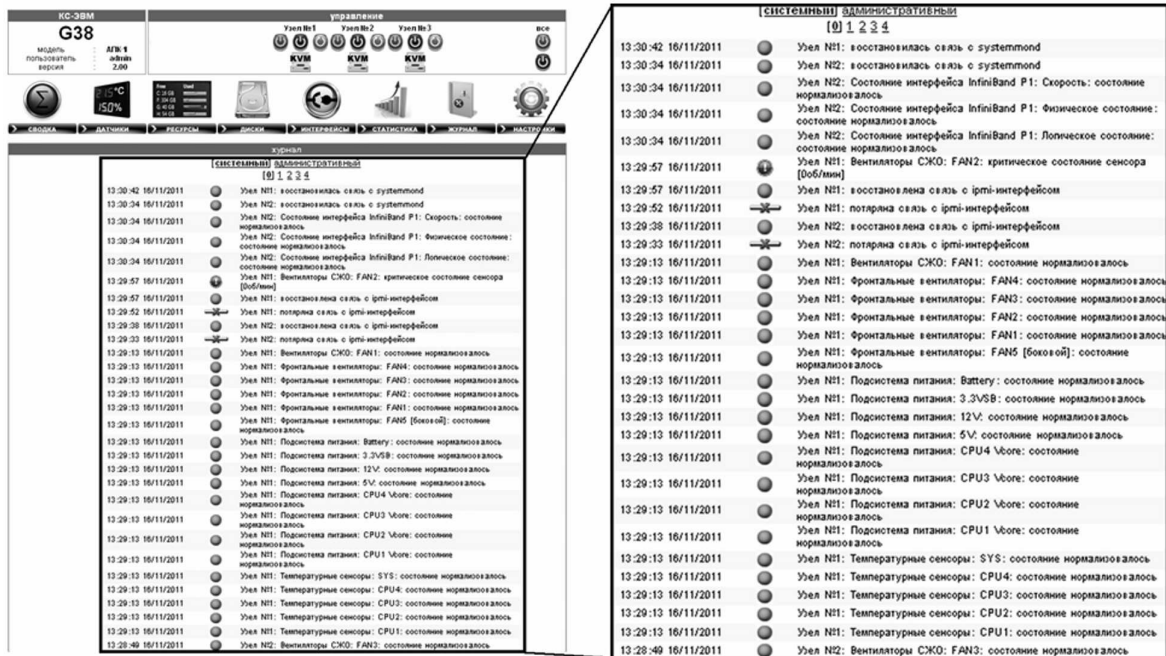


Рис. 13. Раздел "Журнал" WEB-интерфейса системы мониторинга

учет специфики ЭВМ и счета на них задач. Поддерживает последовательные, MPI- и OpenMP-задания. В системе реализован эффективный алгоритм планирования — метод фонового заполнения Backfill;

- система сбора и анализа информации об эффективности выполнения параллельных приложений OpenSTK. Предназначена для мониторинга и анализа эффективности использования вычислительных ресурсов параллельных ЭВМ программными комплексами для организации контроля над выполняемыми приложениями и обеспечения более эффективного счета задач. Также является специализированным профилировщиком параллельных приложений, предоставляющим необходимые средства для разработчиков;
- пакет MPI. Базируется на специализированной версии коммуникационного ПО и реализации библиотеки межпроцессорных обменов MPI, специально разработанной для использования в бескоммутаторных средах межпроцессорного обмена КС-ЭВМ с технологией InfiniBand;
- сетевой менеджер OpenSM, модифицированный для бескоммутаторной топологии коммуникационной среды InfiniBand;
- автоматическая система тестирования АСТ.

Обеспечивает автоматический запуск тестов, сбор полученных результатов и размещение их в базе данных, визуальное представление. Кроме международных тестов, в ее состав входят методические прикладные тесты ВНИИЭФ, разработанные для оценки эффективности мультипроцессорных систем;

- библиотека единого файлового разреза ЕФР. Обеспечивает обмен данными между различными пакетами прикладных программ на основе стандартизированного представления сеточных данных, а также единый интерфейс взаимодействия с сервисными программами для постобработки и визуализации сеточных данных;
- библиотека последовательных и параллельных решателей LParSol. Предназначена для решения больших разреженных линейных систем на структурированных и неструктурированных сетках. Представляет собой объектно-ориентированную переносимую библиотеку высокоэффективных итерационных решателей;
- инструментальные средства отладки параллельных MPI-приложений ParallelDB. Содержат отладчик параллельных приложений PDB с графическим интерфейсом и средства обработки исключительных пре-

- рываний в процессе выполнения параллельного приложения LibFault. Поддерживается отладка приложений, написанных на языках C/C++ и Fortran, использующих библиотеку MPI высокопроизводительной коммуникационной среды;
- универсальное средство параллельной 3D-визуализации ScView. Содержит полноценный набор функций по обработке сеточных данных большого размера. Визуализатор ScView обладает механизмами как полигональной, так и воксельной графики, поддерживает множество форматов представления данных для графической визуализации, в том числе EFR.

Заключение

Результатом работы по созданию компактной суперЭВМ, способной подключаться к обычной офисной розетке, не требовательной к охлаждению и имеющей производительность 1 Тфлоп/с, стала мультипроцессорная вычислительная машина КС-ЭВМ разработки РФЯЦ-ВНИИЭФ. В конструкции КС-ЭВМ применены оригинальные технические решения и подходы. По технико-экономическим параметрам КС-ЭВМ является лидером на рынке в классе персональных суперЭВМ.

Базовые технические решения, примененные в КС-ЭВМ, защищены патентом на полезную модель [5].

Индикатором успешности конструкции КС-ЭВМ является признание и востребованность на рынке высокопроизводительных вычислений. Универсальной компактной суперЭВМ разработки РФЯЦ-ВНИИЭФ оснащен ряд ведущих предприятий авиа-, авто-, космической отраслей промышленности и атомной энергетики.

Список литературы

1. Персональный суперкомпьютер CX1. <http://www.cray.com/CustomerSupport/Legacy.aspx>.

2. *Абрамов С. М.* СуперЭВМ Ряда 4 семейства СКИФ: штурм вершины суперкомпьютерных технологий // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2009): Тр. межд. науч. конф. Нижний Новгород, 30 марта – 3 апреля 2009 г. Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2009. С. 5–16.
3. Компактный суперкомпьютер T-Edge. <http://www.t-platforms.ru/productions.html>.
4. *Стрюков В. Н., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др.* Универсальная компактная суперЭВМ // Супервычисления и математическое моделирование. Сб. тез. докл. XII Межд. семинара. Саров, 11–15 октября 2010 г. С. 329.
5. Патент на полезную модель № 99213 РФ. Компактная суперЭВМ / Шагалиев Р. М., Бартенев Ю. Г., Стрюков В. Н. и др. // Полезные модели. 2010. № 31.
6. *Жуков Д. А., Вялухин В. М.* Особенности реализации коммуникационного программного обеспечения КС-ЭВМ при использовании бескоммутаторной технологии // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 3. С. 63–67.
7. Патент на полезную модель № 113626 РФ. Расширительный бак системы охлаждения / Стрюков В. Н., Логвин Ю. В., Корзаков Ю. Н. и др. // Полезные модели. 2012. № 5.
8. *Шатохин А. В., Дмитриев Н. А., Стрюков В. Н. и др.* Сервисная подсистема универсальной компактной суперЭВМ // Супервычисления и математическое моделирование. Сб. тез. докл. XII Межд. семинара. Саров, 11–15 октября 2010 г. С. 156.

Статья поступила в редакцию 08.12.11.

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

Чернышев Ю. Д., Одинцова М. А., Муругова О. О. Алгоритмы сглаживания возмущений поля скоростей применительно к расчетам по методике Д 3

Бобровский Д. И., Большаков И. В., Разин А. Н. О сходимости разностного решения уравнений турбулентного перемешивания при взаимодействии зоны перемешивания с ударной волной 16

Глушак Б. Л., Игнатова О. Н., Надеждин С. С., Раевский В. А. Релаксационная модель сдвиговой прочности пяти металлов (алюминий, бериллий, медь, тантал, уран) 25

Субботин А. Н. К доказательству эквивалентности линейного интегродифференциального кинетического уравнения Больцмана и интегрального транспортного уравнения типа уравнения Пайерлса 37

Карлыханов Н. Г., Селиванова Н. В. Об одном алгоритме склейки кинетического уравнения с P_1 -приближением уравнения переноса излучения 51

Бабанов А. В., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Ватулин В. В., Винокуров О. А., Гречишкина И. Н., Змущко В. В., Измайлова Т. Б., Митрофанов Е. И., Рябикина Н. А., Шамраев Б. Н. Методика МИМОЗА-НДЗД. Расчет трехмерных задач спектрального переноса излучения 64

Светухин В. В., Кадочкин А. С., Рисованный В. Д. Одномерная модель протекания гелия в поглощающих элементах реакторов ВВЭР 73

Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г., Варгин А. М., Вялухин В. М., Дмитриев Н. А., Жуков Д. А., Игрунов В. И., Корзаков Ю. Н., Кошелев В. В., Лашманов В. Н., Логвин Ю. В., Петрик А. Н., Селякин А. Г., Семёнов Г. П., Стрюков В. Н., Ушаков А. Ю., Чайка А. И., Черных С. О., Шагалиев Р. М., Шатокхин А. В., Шлыков С. Н., Шмаков Е. Л., Ярулин Д. Р. Универсальная компактная суперЭВМ 78

Chernyshev Yu. D., Odintsova M. A., Murugova O. O. Smoothing algorithms of velocity field perturbations as applied to D simulations 3

Bobrovskiy D. I., Bolshakov I. V., Razin A. N. On the difference solution convergence of turbulent mixing equations when mixing zone interacts with shock wave . . 16

Glushak B. L., Ignatova O. N., Nadezhin S. S., Raevskiy V. A. Shear strength relaxation model of five metals (aluminum, beryllium, copper, tantalum, uranium) 25

Subbotin A. N. On equivalence proof of Boltzmann integro-differential linear kinetic equation and integral transport equation of Peierls equation type 37

Karlykhanov N. G., Selivanova N. V. On one algorithm of coalescence of kinetic equation and P_1 -approximation radiation transfer equation 51

Babanov A. V., Bel'kov S. A., Bondarenko S. V., Vatulin V. V., Vinokurov O. A., Grechishkina I. N., Zmushko V. V., Izmailova T. B., Mitrofanov E. I., Ryabikina N. A., Shamraev B. N. MIMOZA-ND3D technique. 3D radiation spectrum transfer simulations 64

Svetukhin V.V., Kadochkin A. S., Risovanyi V. D. 1D model of helium leaking in VVER reactor absorber elements 73

Bartenev Yu. G., Basalov V. G., Vargin A. M., Vyalukhin V. M., Dmitriev N. A., Zhukov D. A., Igrunov V. I., Korzakov Yu. N., Koshelev V. V., Lashmanov V. N., Logvin Yu. V., Petrik A. N., Selaykin A. G., Semenov G. P., Stryukov V. N., Ushakov A. Yu., Chaika A. I., Chernykh S. O., Shagaliev R. M., Shatokhin A. V., Shlykov S. N., Shmakov E. L., Yarulin D. R. General-purpose compact super-computer . . . 78

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Л. В. Мазан,
Е. Н. Старченко

Корректоры В. В. Барышникова,
Е. А. Окальева
А. В. Федоренко

Подписано в печать 16.05.12

Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 11,3

Тираж 1000 экз. Зак. тип.

8 статей

Формат 60×84/8

Уч.-изд. л. ~ 14

Индекс 3642

Оригинал-макет подготовлен в Математическом отделении
Всероссийского научно-исследовательского института
экспериментальной физики

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188 г. Саров Нижегородской обл.

ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате WinWord или LaTeX (с использованием стандартного стиля article).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);

2) разрешение на открытое опубликование от организации, в которой выполнена работа.

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны полностью соответствовать указанным в представленной рукописи. Необходимо также сообщить номер телефона или электронный адрес для обратной связи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием статьи необходимо указать УДК. Разделы и подразделы текста должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, соответствующее стандартам по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например, a и α ("альфа"), v и ν ("ню"), c и C) желательно делать пометки. При этом строчные (малые) буквы следует помечать двумя черточками сверху (например, \bar{c} , \bar{k} , \bar{z} , \bar{d}), а прописные (большие) — двумя черточками снизу (например, \underline{C} , \underline{K} , \underline{Z} , \underline{Q}). Для отличия цифры 0 от буквы O цифру следует перечеркивать косой чертой. Должны различаться по написанию единица, штрих и запятая в индексах, а также буквы e и l , I и J . Необходимо выделять (жирным шрифтом или стрелкой) векторные величины.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисночные подписи. Рисунки также необходимо представить в виде графических файлов в формате .eps или .jpg. Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют символьными (цифровыми) обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисночной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы (отчеты) не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАНТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail:sokol@vniief.ru