

выпуск 3

# Математическое моделирование физических процессов

СЕРИЯ



Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ

ISSN 0367-5203

ФГУП "РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР— ВНИИЭФ"

## ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

## Математическое моделирование физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

выпуск 3

Издается с 1978 г.

Cаров - 2013

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), 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)

> Адрес редакции: 607188, г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, тел. (83130)28406, *e-mail*: sokol@vniief.ru

> > ⓒ ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2013

УДК 517.958:536.2

#### МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ С TVD-РЕКОНСТРУКЦИЕЙ И СИНТЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД УСКОРЕНИЯ ИТЕРАЦИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

#### А. Д. Гаджиев, Д. А. Кошутин, А. А. Шестаков (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск)

Рассматривается новая методика для численного решения одномерного уравнения переноса теплового излучения. Суть нового подхода состоит в применении метода дискретных ординат с TVD-реконструкцией для решения кинетического уравнения и синтетического метода на основе  $P_1$ -приближения для ускорения сходимости итераций при совместном решении уравнения переноса и уравнения энергии.

Ключевые слова: перенос излучения, TVD-схема, итерационный метод.

#### Введение

Разработка эффективного численного метода решения уравнения переноса теплового излучения является сложной проблемой. Для решения кинетического уравнения следует применять схему второго порядка аппроксимации с монотонными свойствами, что продиктовано существующей практикой. Второй порядок и монотонность — это плохо совместимые требования. Еще в 50-х годах прошлого столетия С. К. Годуновым было доказано [1], что для уравнения переноса в классе линейных схем нет схемы второго и более высоких порядков с монотонными свойствами.

Другой стороной исходной проблемы является ускорение сходимости итераций при совместном решении уравнений переноса и энергии. Дело в том, что простые итерации могут сходиться крайне медленно, поскольку спектральный радиус для них может быть сколь угодно близким к единице [2].

В данной работе для преодоления указанных трудностей предлагается при решении кинетического уравнения переноса излучения использовать нелинейную схему, основанную на методе дискретных ординат (St-cxemy) с TVD-реконструкцией, что позволяет совместить второй порядок аппроксимации и монотонность. Такой метод уже был предложен в [3, 4]. В данной работе в отличие от [3, 4] вся добавка от TVD-реконструкции берется с предыдущего шага. Это заметно упрощает схему.

Для ускорения сходимости итераций предлагается применять синтетический метод PSAC ( $P_1$  Synthetic Acceleration Correction Method). В этом методе для ускорения сходимости итераций по кинетическому уравнению используется приближение низкого уровня, а именно  $P_1$ -приближение. Чтобы PSAC-метод был сходящимся, необходимо обеспечивать согласованность разностной схемы  $P_1$ -уравнений со схемой решения кинетического уравнения. Принцип согласованности был сформулирован в работах [5, 6]. Для согласования применяем многошаговую процедуру Ларсена [6], которая позволяет поэтапно согласовать систему  $P_1$ -уравнений, граничные условия и соотношения связи. Окончательная система  $P_1$ -уравнений с граничными условиями и соотношениями связи для ускоряющего этапа приводится к поправочной форме. Следует заметить, что  $P_1$ -приближение в поправочной форме для ускорения сходимости итераций при совместном решении уравнения переноса излучения и уравнения энергии применялось в работах [7, 8].

В работе [9] проведено сравнение решений уравнения переноса излучения методом Райбики и методом выделения диагонального элемента (ВДЭ) в поправочной форме  $P_1$ -уравнений [8]. Показана высокая эффективность метода ускорения сходимости итераций с использованием поправочной

формы *P*<sub>1</sub>-уравнений. Число внешних кинетических итераций близко к предельно возможному минимальному уровню по прямому методу Райбики.

В данной работе в отличие от методов [8, 9] используется новая схема решения уравнения переноса на основе метода дискретных ординат с TVD-реконструкцией и другая схема решения поправочных уравнений  $P_1$ -приближения. Достоинством этого метода является также его обобщаемость на многомерные геометрии.

#### Постановка задачи

Система уравнений распространения излучения в неподвижной среде состоит из спектрального уравнения переноса в кинетической постановке, описывающего перенос, поглощение и рассеяние теплового излучения, и уравнения энергии, характеризующего изменение температуры вещества за счет поглощения и испускания фотонов. Данная система без учета движения среды для изотропного рассеяния выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial J_g}{\partial t} + \frac{\mu}{r^{\eta}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{\eta}J_g\right) + \frac{\eta}{2r}\frac{\partial}{\partial\mu}\left[\left(1-\mu^2\right)J_g\right] + \alpha_g J_g = \frac{1}{2}\left(\alpha_{cg}B_g + \alpha_{sg}U_g\right) = Q_g;$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}\left(U_g - B_g\right); \qquad g = 1, 2, \dots, G.$$
(1)

Здесь c — скорость света; r — пространственная координата; t — время;  $\mu$  — косинус угла между направлением полета фотона и осью x;  $J_g$  — интенсивность излучения группы g;  $\alpha_{cg}$  — коэффициент поглощения;  $\alpha_{sg}$  — коэффициент рассеяния;  $\alpha_g = \alpha_{cg} + \alpha_{sg}$ ; E(T) — удельная внутренняя энергия вещества, где T(x,t) — температура среды;  $B_g(T)$  — интенсивность равновесного излучения группы g;  $U_g = \int_{-1}^{1} J_g d\mu$  — спектральная плотность энергии излучения, умноженная на c;  $\eta = 0$  — плоская геометрия;  $\eta = 2$  — сферически-симметричная геометрия.

Система (1) решается с граничными условиями

$$J_g(R,\mu,t) = \phi_g(\mu,t)$$
для  $\mu \le 0.$  (2)

Начальное условие:

$$J_{g}(r,\mu,t)/_{t=t^{0}} = J_{g}^{0}(r,\mu).$$
(3)

#### Разностная аппроксимация

Систему (1) будем аппроксимировать по  $DS_n$ -методу. Запишем интегральный закон сохранения для стандартной ячейки  $\{r_i \leq r \leq r_{i+1}, \mu_{m-1/2} \leq \mu \leq \mu_{m+1/2}\}$ :

$$\frac{\Delta V_{i}}{\tau^{n}c} \left( J_{g,m,i+1/2}^{n+1} - J_{g,m,i+1/2}^{n} \right) + \mu_{m} \left( r_{i+1}^{\eta} J_{g,m,i+1}^{n+1} - r_{i}^{\eta} J_{g,m,i}^{n+1} \right) + \\
+ \frac{\eta}{2} \frac{\varsigma_{i}}{\omega_{m}} \left( a_{m+1/2} J_{g,m+1/2,i+1/2}^{n+1} - a_{m-1/2} J_{g,m-1/2,i+1/2}^{n+1} \right) + \alpha_{g,i+1/2} \Delta V_{i} J_{g,m,i+1/2}^{n+1} = Q_{g,i+1/2} \Delta V_{i}; \quad (4)$$

$$\frac{E_{i+1/2}^{n+1} - E_{i+1/2}^{n}}{\varepsilon_{i+1/2}^{n}} = \sum_{i=1}^{G} \alpha_{i} \left( U_{i} - R_{i} \right)^{n+1} ; \quad (5)$$

$$\frac{i+1/2}{\tau^n} = \sum_{g=1}^{n} \alpha_{cg} \left( U_g - B_g \right)_{i+1/2}^{n+1};$$
(5)

 $i = 0, 1, \dots, I - 1;$   $m = 0, 1, \dots, M;$   $g = 1, 2, \dots, G.$ 

Здесь  $\tau^n = t^{n+1} - t^n$ ;  $\Delta V_i = \frac{1}{\eta+1} \left( r_{i+1}^{\eta+1} - r_i^{\eta+1} \right)$ ;  $\varsigma_i = r_{i+1}^{\eta} - r_i^{\eta}$ ;  $\omega_m$  — веса квадратурных формул. В плоском случае  $\eta = 0$  и величины  $J_{g,m+1/2,i+1/2}$  не используются. Коэффициенты  $a_{m+1/2}$  определяются из рекуррентных соотношений

$$a_{m+1/2} = a_{m-1/2} - \omega_m \mu_m;$$
  $a_{-1/2} = a_{1/2} = a_{M+1/2} = 0.$ 

Монотонная St-схема первого порядка аппроксимации для системы (4) имеет соотношения связи вида (в дальнейшем там, где это не вызывает недоразумения, разностные индексы опускаются)

$$J_{i+1}^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1}, \qquad \mu_m > 0;$$
  

$$J_i^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1}, \qquad \mu_m < 0;$$
  

$$J_{i+1/2,m+1/2}^{n+1} = J_{i+1/2,m}^{n+1}.$$

Для повышения порядка аппроксимации проведем реконструкцию решения на сеточных интервалах. Представим интенсивность на интервале  $r_i \leq r \leq r_{i+1}$  в кусочно-линейной форме:

$$J(r,\mu,t) = J_{i+1/2} + rac{\partial J_{i+1/2}}{\partial r} (r - r_{i+1/2}), \qquad r_{i+1/2} = 0.5 (r_i + r_{i+1}).$$

Отсюда имеем следующие реконструированные соотношения связи:

$$J_{i+1}^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} + \frac{\partial J_{i+1/2}^{n+1}}{\partial r} \frac{h}{2}, \qquad \mu > 0;$$
  
$$J_{i}^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} - \frac{\partial J_{i+1/2}^{n+1}}{\partial r} \frac{h}{2}, \qquad \mu < 0.$$

В соответствии с TVD-методологией в качестве  $\frac{\partial J_{i+1/2}}{\partial r}$  берутся некоторые ограничители, которые обычно используют односторонние производные. Если ввести традиционную для TVD-схем функцию-ограничитель

$$\phi_{i+1/2} = rac{L\left(\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2}
ight)}{\Delta J_{i-1/2}}$$

то можно записать

$$\begin{split} J_{i+1}^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} + 0.5\phi_{i+1/2}^{n+1}\Delta J_{i-1/2}^{n+1}, \qquad \mu > 0; \\ J_{i}^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} - 0.5\phi_{i+1/2}^{n+1}\Delta J_{i-1/2}^{n+1}, \qquad \mu < 0, \end{split}$$

где  $\Delta J_{i-1/2} = J_{i+1/2} - J_{i-1/2}.$ 

Система полученных уравнений представляет собой схему с четырехточечным шаблоном на (n + 1)-м слое. Так как функция-ограничитель  $\phi$  имеет дробно-линейный характер, то можно ожидать, что она слабо меняется за один шаг  $\tau$ . Таким образом, можно взять  $\phi$  с *n*-го шага, внося при этом погрешность  $O(\tau)$ . Если в этой системе уравнений взять с *n*-го шага не только функцию-ограничитель  $\phi$ , но и саму разность  $\Delta J_{i-1/2}^n$ , то можно записать

$$\begin{split} J_{i+1}^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} + 0.5 \phi_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n, \qquad \mu > 0; \\ J_i^{n+1} &= J_{i+1/2}^{n+1} - 0.5 \phi_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n, \qquad \mu < 0. \end{split}$$

В этом случае получаем возможность применить алгоритм бегущего счета.

Систему (4), (5) будем решать итерационно. Введем итерационный индекс  $\sigma$  и в качестве соотношений связи будем брать:

$$\begin{aligned} - & \operatorname{прм} \ \mu_m > 0 \qquad J_{i+1}^{\sigma+1} = J_{i+1/2}^{\sigma+1} + d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n, \quad d_{i+1/2}^n = \frac{L\left(\Delta J_{i-1/2}^n, \Delta J_{i+1/2}^n\right)}{2\Delta J_{i-1/2}^n}; \\ - & \operatorname{прм} \ \mu_m < 0 \qquad J_i^{\sigma+1} = J_{i+1/2}^{\sigma+1} - d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n; \\ & J_{i+1/2,m+1/2}^{\sigma+1} = J_{i+1/2,m}^{\sigma+1} + (d_0)_m^n \ \Delta J_{m-1}^n, \quad (d_0)_m^n = \frac{L\left(\Delta J_{m-1}^n, \Delta J_m^n\right)}{2\Delta J_{m-1}^n} \end{aligned}$$

При  $d = d_0 = 0$  получаем соотношения St-схемы.

Подставляя эти соотношения связи в основное уравнение (4), получаем:

$$\begin{split} &- \text{ при } \mu_m > 0 \\ &i = 0, 1, \dots, I-1; \qquad m = 0, 5M+1, \dots, M; \qquad g = 1, 2, \dots, G; \\ &\left(q_g + \mu_m \frac{r_{i+1}^{\eta}}{\Delta V_{i+1/2}} + \frac{\eta}{2} \frac{\varsigma_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} \frac{a_{m+1/2}}{w_m}\right) J_{i+1/2,m,g}^{\sigma+1} = \\ &= \frac{1}{c\tau} J_{i+1/2,m,g}^n + Q_g^\sigma + \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_i^\eta J_{i,m,g}^{\sigma+1} + \frac{\eta}{2w_m} \frac{\varsigma_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m-1/2} J_{i+1/2,m-1/2,g}^{\sigma+1} - \\ &- \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_{i+1}^\eta d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2,m,g}^n - \frac{\eta}{2w_m} \frac{\varsigma_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m+1/2} (d_0)_m^n \Delta J_{i+1/2,m-1,g}^n; \\ &J_{i+1,m,g}^{\sigma+1} = J_{i+1/2,m,g}^{\sigma+1} + d_{i+1/2,m,g}^n \Delta J_{i-1/2,m,g}^n; \\ &J_{i+1/2,m+1/2,g}^{\sigma+1} = J_{i+1/2,m,g}^{\sigma+1} + (d_0)_{i+1/2,m,g}^n \Delta J_{i+1/2,m-1,g}^n; \end{split}$$

- при  $\mu_m < 0$ 

$$\begin{split} i &= I - 1, \dots, 0; \qquad m = 0, 1, \dots, 0, 5M; \qquad g = 1, 2, \dots, G; \\ \left(q_g - \mu_m \frac{r_i^{\eta}}{\Delta V_{i+1/2}} + \frac{\eta}{2} \frac{\varsigma_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} \frac{a_{m+1/2}}{w_m}\right) J_{i+1/2,m,g}^{\sigma+1} = \\ &= \frac{1}{c\tau} J_{i+1/2,m,g}^n + Q_g^{\sigma} - \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_{i+1}^{\eta} J_{i+1,m,g}^{\sigma+1} + \frac{\eta}{2w_m} \frac{\varsigma_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m-1/2} J_{i+1/2,m-1/2,g}^{\sigma+1} - \\ &- \frac{\mu_m}{\Delta V_{i+1/2}} r_i^{\eta} d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2,m,g}^n - \frac{\eta}{2w_m} \frac{\varsigma_{i+1/2}}{\Delta V_{i+1/2}} a_{m+1/2} \left(d_0\right)_m^n \Delta J_{i+1/2,m-1,g}^n; \\ J_{i,m,g}^{\sigma+1} = J_{i+1/2,m,g}^{\sigma+1} - d_{i+1/2,m,g}^n \Delta J_{i-1/2,m,g}^n; \\ J_{i+1/2,m+1/2,g}^{\sigma+1} = J_{i+1/2,m,g}^{\sigma+1} + \left(d_0\right)_{i+1/2,m,g}^n \Delta J_{i+1/2,m-1,g}^n; \end{split}$$

где 
$$q_g = \frac{1}{c\tau} + \alpha_g; \ d_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n = 0.5L\left(\Delta J_{i-1/2}^n, \Delta J_{i+1/2}^n\right) = 0.5L\left(J_{i+1/2}^n - J_{i-1/2}^n, J_{i+3/2}^n - J_{i+1/2}^n\right).$$

#### Синтетический метод ускорения итераций (метод PSAC)

Для ускорения сходимости итераций предлагается применять синтетический метод PSAC. В этом методе для ускорения итераций по кинетическому уравнению используется  $P_1$ -приближение. Для согласования схемы  $P_1$ -уравнений со схемой решения кинетического уравнения применяем многошаговую процедуру Ларсена, которая позволяет поэтапно согласовать систему  $P_1$ -уравнений, граничные условия и соотношения связи. Многошаговая процедура Ларсена включает в себя:

- 1) Р<sub>1</sub>-проектирование разностных уравнений для уравнения переноса;
- 2) Р<sub>1</sub>-проектирование соотношений связи для уравнения переноса;
- 3) Р<sub>1</sub>-проектирование граничных условий;
- 4) переход к *P*<sub>1</sub>-уравнениям относительно поправок;
- 5) преобразование полученных уравнений к виду с центральными разностями и их решение.

В синтетическом методе на каждой внешней итерации ( $\sigma$  — итерационный индекс) совместно с уравнением энергии сначала решается кинетическое уравнение с внутренними (ньютоновскими) итерациями по температуре (этап 1), а затем поправочная система  $P_1$ -уравнений с ньютоновскими итерациями по температуре (этап 2). При описании итерационных циклов там, где нет необходимости, опустим индексы i, m и g. Этап 1. Решаются кинетическое уравнение и уравнение энергии:

$$\frac{J^{\sigma+1/2} - J^n}{c\tau} + \operatorname{div}_h \left(\vec{\Omega}J\right)^{\sigma+1/2} + \alpha^{\sigma}J^{\sigma+1/2} = Q^{\sigma};$$
(6)

$$\frac{E^{\sigma+1/2} - E^n}{\tau} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} \left( U_g^{\sigma+1/2} - B_g^{\sigma+1/2} \right).$$
(7)

Просуммируем уравнение (6) по  $\mu$  с весами 1 и  $\mu$ :

1

$$\frac{U^{\sigma+1/2} - U^n}{c\tau} + \operatorname{div}_h\left(r^\eta S^{\sigma+1/2}\right) + \alpha^\sigma U^{\sigma+1/2} = 2Q^\sigma;$$
(8)

$$\frac{S^{\sigma+1/2} - S^n}{c\tau} + DU^{\sigma+1/2} + \alpha^{\sigma} S^{\sigma+1/2} = 0,$$
(9)

где

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_{h}\left(r^{\eta}S^{\sigma+1/2}\right) &= \sum_{m=1}^{M} \omega_{m}\operatorname{div}_{h}\left(\vec{\Omega}J\right)^{\sigma+1/2} = \frac{1}{\Delta V_{i+1/2}} \left(r_{i+1}^{\eta}S_{g,i+1}^{\sigma+1/2} - r_{i}^{\eta}S_{g,i}^{\sigma+1/2}\right), \\ S_{g,i}^{\sigma+1/2} &= \sum_{m=1}^{M} \mu_{m}\omega_{m}J_{g,m,i}^{\sigma+1/2}; \\ DU^{\sigma+1/2} &= \sum_{m=1}^{M} \mu_{m}\operatorname{div}_{h}\left(\vec{\Omega}J\right)^{\sigma+1/2} \omega_{m} = \frac{1}{\Delta V_{i+1/2}} \sum_{m=1}^{M} \mu_{m}^{2}\omega_{m}\left(r_{i+1}^{\eta}J_{g,m,i+1}^{\sigma+1/2} - r_{i}^{\eta}J_{g,m,i}^{\sigma+1/2}\right) + \\ &+ \frac{\eta}{2} \frac{\varsigma_{i}}{\Delta V_{i+1/2}} \sum_{m=1}^{M} \mu_{m}\left(a_{m+1/2}J_{g,m+1/2,i+1/2}^{\sigma+1/2} - a_{m-1/2}J_{g,m-1/2,i+1/2}^{\sigma+1/2}\right). \end{aligned}$$

Уравнение (9) приведем к виду

$$\frac{S^{\sigma+1/2} - S^n}{c\tau} + \frac{1}{3} \operatorname{div}_h U^{\sigma+1/2} + \alpha^{\sigma} S^{\sigma+1/2} = Q_1^{\sigma+1/2}, \tag{10}$$

где  $\operatorname{div}_h U = \frac{U_{i+1} - U_i}{h_{i+1/2}}; \ h_{i+1/2} = r_{i+1} - r_i; \ Q_1^{\sigma+1/2} = \frac{1}{3} \operatorname{div}_h U^{\sigma+1/2} - DU^{\sigma+1/2} -$ корректирующая поправка на кинетичность.

Перейдем к рассмотрению уравнения энергии. Для его решения на первом этапе линеаризуем по температуре внутреннюю энергию и функцию Планка:

$$\left(E^{\sigma+1/2}\right)^{\nu+1} = E^{\nu}\left(T\right) + E_{T}^{\nu}\left(T^{\nu+1} - T^{\nu}\right); \qquad \left(B^{\sigma+1/2}\right)_{g}^{\nu+1} = B_{g}^{\nu}\left(T\right) + B_{gT}^{\nu}\left(T^{\nu+1} - T^{\nu}\right),$$

где  $E_T^{\nu} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)^{\nu}$ ;  $B_{gT}^{\nu} = \left(\frac{\partial B_g}{\partial T}\right)^{\nu}$ . Подставляя значения  $U_g^{\sigma+1/2}$ , полученные на этом этапе, в линеаризованное по температуре уравнение энергии, получаем выражение для нахождения температуры:

$$T_{i+1/2}^{\nu+1} = T_{i+1/2}^{\nu} + \left[ \frac{E^n - E^{\nu} + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^{\sigma} \left( U_g^{\sigma+1/2} - B_g^{\nu} \right)}{E_T^{\nu} + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^{\sigma} B_{gT}^{\nu}} \right]_{i+1/2}$$

При сходимости итераций по линеаризации E(T) и  $B_g(T)$  получаем температуру  $T^{\nu+1}$ , по которой вычисляем  $B_g^{\nu+1}$  во всех точках разностной и энергетической сеток. Итерации  $\nu$  заканчиваются

при выполнении условий  $\left|T_{i+1/2}^{\nu+1} - T_{i+1/2}^{\nu}\right| \leq \varepsilon_{cx}^{\nu} \left(\varepsilon_1 + T_{i+1/2}^{\nu}\right)$ . Точность вычисления температуры определяется константами сходимости  $\varepsilon_{cx}^{\nu}$ ,  $\varepsilon_1$ . При сходимости итераций переходим к следующему этапу.

Этап 2. Уравнение переноса в *P*<sub>1</sub>-приближении совместно с уравнением энергии для PSACметода будем брать в следующей форме:

$$\frac{U^{\sigma+1} - U^n}{c\tau} + \operatorname{div}_h\left(r^{\eta}S^{\sigma+1}\right) + \alpha^{\sigma}U^{\sigma+1} = 2Q^{\sigma+1}; \tag{11}$$

$$\frac{S^{\sigma+1} - S^n}{c\tau} + \frac{1}{3} \operatorname{div}_h U^{\sigma+1} + \alpha^{\sigma} S^{\sigma+1} = Q_1^{\sigma+1/2};$$
(12)

$$\frac{E^{\sigma+1} - E^n}{\tau} = \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} \left( U_g^{\sigma+1} - B_g^{\sigma+1} \right).$$
(13)

Вычитая из системы (11)—(13) уравнения (8), (10), (7), получаем поправочную форму для  $P_1$ -приближения:

$$\frac{\delta U^{\sigma+1}}{c\tau} + \operatorname{div}_h \left( r^{\eta} \delta S^{\sigma+1} \right) + \alpha^{\sigma} \delta U^{\sigma+1} = \alpha_c^{\sigma} \left( B^{\sigma+1} - B^{\sigma} \right) + \alpha_s^{\sigma} \left( U^{\sigma+1} - U^{\sigma} \right); \tag{14}$$

$$\frac{\delta S^{\sigma+1}}{c\tau} + \frac{1}{3} \operatorname{div}_h \left(\delta U\right)^{\sigma+1} + \alpha^{\sigma} \delta S^{\sigma+1} = 0; \tag{15}$$

$$\frac{\delta E^{\sigma+1}}{\tau} = \sum_{g=1}^{G} \alpha_{cg} \left( \delta U_g^{\sigma+1} - \delta B_g^{\sigma+1} \right),\tag{16}$$

где  $\delta U^{\sigma+1} = U^{\sigma+1} - U^{\sigma+1/2}$ ;  $\delta S^{\sigma+1} = S^{\sigma+1} - S^{\sigma+1/2}$ ;  $\delta E^{\sigma+1} = E^{\sigma+1} - E^{\sigma+1/2}$ ;  $\delta B^{\sigma+1} = B^{\sigma+1} - B^{\sigma+1/2}$ . Правую часть уравнения (14) приведем к виду

$$\begin{split} \alpha^{\sigma}_{cg} \left( B^{\sigma+1}_g - B^{\sigma}_g \right) + \alpha^{\sigma}_{sg} \left( U^{\sigma+1}_g - U^{\sigma}_g \right) &= \alpha^{\sigma}_{cg} \left( B^{\sigma+1}_g - B^{\sigma+1/2}_g \right) + \alpha^{\sigma}_{sg} \left( U^{\sigma+1}_g - U^{\sigma+1/2}_g \right) + \\ &+ \delta Q^{\sigma+1/2}_g = \alpha^{\sigma}_{cg} \delta B^{\sigma+1}_g + \alpha^{\sigma}_{sg} \delta U^{\sigma+1}_g + \delta Q^{\sigma+1/2}_g, \end{split}$$

где  $\delta Q_g^{\sigma+1/2} = \alpha_{cg}^{\sigma} \left( B_g^{\sigma+1/2} - B_g^{\sigma} \right) + \alpha_{sg}^{\sigma} \left( U_g^{\sigma+1/2} - U_g^{\sigma} \right).$ 

Для решения уравнения энергии на втором этапе линеаризуем по температуре поправки внутренней энергии и функции Планка с индексом  $\sigma + 1$ :

$$\begin{split} \delta E^{\sigma+1} &= E^{\sigma+1} \left( T^{\sigma+1} \right) - E^{\sigma+1/2} \left( T^{\sigma+1/2} \right) = E^{\sigma+1} \left( T^{k+1} \right) - E^{\sigma+1/2} = E^{k+1} - E^{\sigma+1/2} = \\ &= E^k + E_T^k \left( T^{k+1} - T^k \right) - E^{\sigma+1/2} = E^k + E_T^k \delta T^{k+1} - E^{\sigma+1/2}; \\ \delta B_g^{\sigma+1} &= B_g^k + B_{gT}^k \delta T^{k+1} - B_g^{\sigma+1/2}, \end{split}$$

где k — индекс ньютоновских итераций на втором этапе;  $T^{k=0} = T^{\sigma+1/2}$ .

Подставляя эти выражения в уравнение энергии (16), получаем выражение для нахождения температуры:

$$\delta T_{i+1/2}^{k+1} = \left[ \frac{E^{\sigma+1/2} - E^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^{\sigma} \left( \delta U_g^{k+1} - B_g^k + B_g^{\sigma+1/2} \right)}{E_T^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^{\sigma} B_{gT}^k} \right]_{i+1/2}.$$
(17)

Подставляя значения (17) в линеаризованную по температуре правую часть уравнения (14), получаем выражение в правой части уравнения (14) относительно  $\delta U_g^{k+1}$  с заменой индекса  $\sigma + 1$  на индекс k + 1:

$$\begin{split} \alpha_{cg}^{\sigma} \delta B_{g}^{\sigma+1} + \alpha_{sg}^{\sigma} \delta U_{g}^{\sigma+1} + \delta Q_{g}^{\sigma+1/2} &= \alpha_{cg}^{\sigma} \delta B_{g}^{k+1} + \alpha_{sg}^{\sigma} \delta U_{g}^{k+1} + \delta Q_{g}^{\sigma+1/2} = \\ &= \alpha_{cg}^{\sigma} \left( B_{g}^{k} - B_{g}^{\sigma+1/2} \right) + \alpha_{cg}^{\sigma} B_{gT}^{k} \left[ \frac{E^{\sigma+1/2} - E^{k} + \tau \sum_{g=1}^{G} \alpha_{cg}^{\sigma} \left( \delta U_{g}^{k+1} - B_{g}^{k} + B_{g}^{\sigma+1/2} \right) \right] \\ &+ E_{T}^{k} + \tau \sum_{g=1}^{G} \alpha_{cg}^{\sigma} B_{gT}^{k} \\ &+ \alpha_{sg}^{\sigma} \delta U_{g}^{k+1} + \delta Q_{g}^{\sigma+1/2} = \alpha_{sg}^{\sigma} \delta U_{g}^{k+1} + \tau \lambda^{k} \alpha_{cg}^{\sigma} B_{gT}^{k} \sum_{g=1}^{G} \alpha_{cg}^{\sigma} \delta U_{g}^{k+1} + \delta F_{g}^{k} + \delta Q_{g}^{\sigma+1/2}, \end{split}$$

где

$$\begin{split} \delta F_g^k &= \alpha_{cg}^{\sigma} \left\{ \left( B_g^k - B_g^{\sigma+1/2} \right) + \lambda B_{gT}^k \left[ E^{\sigma+1/2} - E^k + \tau \sum_{g=1}^G \alpha_{cg}^{\sigma} \left( B_g^{\sigma+1/2} - B_g^k \right) \right] \right\};\\ \lambda_{i+1/2} &= \left( E_T + \tau \sum_{g'=1}^G \alpha_{cg'} B_{g'T} \right)_{i+1/2}^{-1}. \end{split}$$

Для решения системы (14), (15) введем дополнительные соотношения, связывающие значения поправок в центрах и узлах интервалов разностной сетки:

$$\delta U_i = \frac{\delta U_{i+1/2} + \delta U_{i-1/2}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \left( \delta S_{i+1/2} - \delta S_{i-1/2} \right); \tag{18}$$

$$\delta S_i = \frac{\delta S_{i+1/2} + \delta S_{i-1/2}}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \left( \delta U_{i+1/2} - \delta U_{i-1/2} \right). \tag{19}$$

Подставляя соотношения связи (18), (19) в систему (14), (15), получаем следующие уравнения:

$$a_{i}^{0}\delta U_{i-1/2} + b_{i}^{0}\delta U_{i+1/2} + c_{i}^{0}\delta U_{i+3/2} + d_{i}^{0}\delta S_{i-1/2} + e_{i}^{0}\delta S_{i+1/2} + g_{i}^{0}\delta S_{i+3/2} = f_{i}^{0};$$

$$a_{i}^{1}\delta U_{i-1/2} + b_{i}^{1}\delta U_{i+1/2} + c_{i}^{1}\delta U_{i+3/2} + d_{i}^{1}\delta S_{i-1/2} + e_{i}^{1}\delta S_{i+1/2} + g_{i}^{1}\delta S_{i+3/2} = f_{i}^{1},$$
(20)

где 
$$a_i^0 = -\frac{r_i^\eta}{\sqrt{3}}; \ b_i^0 = 2V_{i+1/2} \ (q_1)_{i+1/2}^\sigma + \frac{r_i^\eta + r_{i+1}^\eta}{\sqrt{3}}; \ c_i^0 = -\frac{r_{i+1}^\eta}{\sqrt{3}}; \ d_i^0 = -r_i^\eta; \ e_i^0 = r_{i+1}^\eta - r_i^\eta; \ g_i^0 = r_{i+1}^\eta;$$
  
 $a_i^1 = -1; \ b_i^1 = 0; \ c_i^1 = 1; \ d_i^1 = -\sqrt{3}; \ e_i^1 = 6hq_{i+1/2}^\sigma + 2\sqrt{3}; \ g_i^1 = -\sqrt{3}; \ q = \frac{1}{c\tau} + \alpha; \ q_1 = \frac{1}{c\tau} + \alpha_c;$   
 $f_i^0 = 2V_{i+1/2} \left( \frac{\tau \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k \sum\limits_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma \delta U_g^{k+1}}{E_T^k + \tau \sum\limits_{g=1}^G \alpha_{cg}^\sigma B_{gT}^k} + \delta F_g^k + \delta Q_g^{\sigma+1/2} \right); \ f_i^1 = 0; \ i = 0, \dots, I-1.$ 

Если выражение  $\left(\sum_{g'=1}^{G} \alpha_{cg'} \delta U_{g'}^{k+1}\right)_{i+1/2}$  в системе (20) перенести в левую часть уравнения, объединив диагональные члены при g' = g с коэффициентами  $b_i^0$ , то система (20) примет вид

$$\left(a_{i}^{0}\delta U_{i-1/2} + \bar{b}_{i}^{0}\delta U_{i+1/2} + c_{i}^{0}\delta U_{i+3/2} + d_{i}^{0}\delta S_{i-1/2} + e_{i}^{0}\delta S_{i+1/2} + g_{i}^{0}\delta S_{i+3/2}\right)_{g}^{k+1} - \frac{1}{2}\left(a_{i}^{0}\delta U_{i+1/2} + a_{i}^{0}\delta U_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i-1/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+1/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2}\right)_{g}^{k+1} - \frac{1}{2}\left(a_{i}^{0}\delta U_{i+1/2} + a_{i}^{0}\delta U_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i-1/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+1/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2}\right)_{g}^{k+1} - \frac{1}{2}\left(a_{i}^{0}\delta U_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2}\right)_{g}^{k+1} - \frac{1}{2}\left(a_{i}^{0}\delta U_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2}\right)_{g}^{k+1} - \frac{1}{2}\left(a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2} + a_{i}^{0}\delta S_{i+3/2} + a_$$

$$-2\tau \left[ V\lambda^{k}\alpha_{cg}B_{gT}^{k}\sum_{g'=1}^{G} \left(\alpha_{cg'}-\alpha_{cg}\right)\delta U_{g'}^{k+1} \right]_{i+1/2} = \left(f_{i}^{01}\right)_{g}^{\sigma+1/2};$$
(21)

$$\left(a_{i}^{1}\delta U_{i-1/2}+b_{i}^{1}\delta U_{i+1/2}+c_{i}^{1}\delta U_{i+3/2}+d_{i}^{1}\delta S_{i-1/2}+e_{i}^{1}\delta S_{i+1/2}+g_{i}^{1}\delta S_{i+3/2}\right)_{g}^{k+1}=\left(f_{i}^{1}\right)_{g}^{\sigma+1/2},$$

где 
$$(f_i^{01})_g^{\sigma+1/2} = 2V_{i+1/2} \left(\delta F_g^k + \delta Q_g^{\sigma+1/2}\right)_{i+1/2}; \ (f_i^1)_g^{\sigma+1/2} = 0; \ \lambda_{i+1/2} = \left(E_T + \tau \sum_{g'=1}^G \alpha_{cg'} B_{g'T}\right)_{i+1/2};$$
  
 $\bar{b}_i^0 = b_i^0 - 2\tau \left(V\lambda^k B_{gT}^k \alpha_{cg}^2\right)_{i+1/2}; \ i = 0, \dots, I-1; \ g = 1, \dots, G.$ 

Разностная система (21) решается с граничными условиями  $0.5\delta U_g \pm \delta S_g = 0.$ 

Систему уравнений (21) решаем сразу для всех групп G прямым обращением всей матрицы коэффициентов разностной системы. После обращения матрицы вычисляем температуру по формуле  $T_{i+1/2}^{k+1} = T_{i+1/2}^k + \delta T_{i+1/2}^{k+1}$ .

При сходимости итераций второго этапа переходим на новую внешнюю итерацию  $\sigma$ . При сходимости итераций  $\sigma$  переходим на следующий шаг по времени.

#### Численные расчеты

Для исследования новой схемы рассмотрим аналог задачи Флека [10] в сферически-симметричной геометрии. На внутреннюю поверхность сферического слоя толщиной 4 см падает планковский поток излучения, соответствующий температуре вещества T = 1 кэВ. Слой состоит из трех физических областей. Радиус внутренней сферы 100 см, внешней — 104 см. Спектральные граничные условия на внешней границе имеют вид  $\varphi_R = 0$ . На внутренней границе  $\varphi_L = 0.5B$  (T = 1 кэВ). Коэффициент поглощения вычислялся по формуле  $\alpha_c = \frac{\chi \left(1 - e^{-\varepsilon/T}\right)}{\varepsilon^3}$ ,  $\chi = 27$  в области 1 (102 см < r < 102.4 см) и в области 3 (102.4 см < r < 104 см),  $\chi = 10000$  в области 2 (102 см < r < 102.4 см). Коэффициент рассеяния  $\alpha_s = 0$ . Начальная температура в областях T = 0.00001 кэВ, уравнение состояния вещества E = 0.81T.

По энергетической переменной расчеты выполнены на сетке  $\varepsilon_g = 0$ ; 0,3; 0,6; 0,8; 1,2; 1,5; 1,8; 2,4; 2,7; 3; 4; 5; 7; 9; 11; 15 кэВ (число групп 15). По пространству использовалась неравномерная сетка (24, 14, 18 интервалов в областях 1, 2, 3 соответственно) со следующими узлами (в см):  $r_1 = 100$ ; 100,004; 100,04;  $r_4 = 100,1; \ldots; r_{22} = 101,9$  (18 интервалов равномерно по  $r, \Delta r = 0,1$ );  $r_{23} = 101,987$ ; 101,999; 102; 102,001; 102,004; 102,013;  $r_{29} = 102,04;\ldots; r_{37} = 102,36$  (8 интервалов равномерно по  $r, \Delta r = 0,04$ );  $r_{38} = 102,396$ ; 102,4; 102,404; 102,44;  $r_{42} = 102,5;\ldots; r_{57} = 104$  (15 интервалов равномерно по  $r, \Delta r = 0,1$ ). В пространстве направлений использовалась равномерная сетка  $\Delta \mu = 0,2$ .

Расчеты проводились по TVD- и St-схемам. В качестве ограничителей для схемы TVD взяты ограничители Чакравати—Ошера [11] и minmod, который является его частным случаем.

Для ограничителя Чакравати-Ошера имеем

$$L(a, b) = 0.5 (1 - \delta) \min \operatorname{mod} (a, \beta b) + 0.5 (1 + \delta) \min \operatorname{mod} (\beta a, b),$$

или в виде функции-ограничителя

$$\phi_{i+1/2} = 0.5 \left(1 - \delta\right) \min \mod \left(1, \beta \widehat{\theta}_{i+1/2}\right) + 0.5 \left(1 + \delta\right) \min \mod \left(\beta, \widehat{\theta}_{i+1/2}\right)$$

где  $\phi_{i+1/2} = \frac{L\left(\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2}\right)}{\Delta J_{i-1/2}} = L\left(1, \widehat{\theta}_{i+1/2}\right), \widehat{\theta}_{i+1/2} = \frac{\Delta J_{i+1/2}}{\Delta J_{i-1/2}}; a$  – значение разности на входе из ячейки;  $\beta$  – параметр сжатия. Параметр  $\delta$  определяет тип схемы и порядок аппроксимации. Для ограничителя Чакравати—Ошера полагалось  $\delta = 1/3, \beta = 3.$ 

Для ограничителя min mod ( $\delta = 0, \ \beta = 1$ ) имеем  $\phi_{i+1/2}^n = \frac{1 + \operatorname{sign}\left(\widehat{\theta}_{i+1/2}^n\right)}{2} \min\left(1, \left|\widehat{\theta}_{i+1/2}^n\right|\right).$ 

На рис. 1 приведены профили температуры вещества на три момента времени. Выбраны характерные моменты движения тепловой волны: ct = 3 см — прогрев области 1, вхождение и начало распространения излучения в плотном веществе; ct = 7,5 см — прогрев области 2; ct = 180 см прогрев области 3, выход на стационарный режим (соответственно 10, 25 и 600-й шаги по времени при  $\tau = 10^{-11}$  с,  $\varepsilon_{cx} = 0,0001$ ). Решение сравнивается с эталонным расчетом, проведенным на 4000 интервалах разностной сетки. Для наглядности на рис. 1 снизу изображен фрагмент указанных про-



Рис. 1. Профили температуры вещества на 10 (1), 25 (2) и 600-м шаге (3): — эталонное решение; ----TVD-схема с ограничителем min mod; ···- TVD-схема с ограничителем Чакравати-Ошера; -·-- St-схема

филей в увеличенном масштабе. Видно, что St-схема сильно размазывает профиль, TVD-схема с ограничителем Чакравати—Ошера дает наилучший результат, TVD-схема с ограничителем min mod дает промежуточный результат.

На рис. 2 приведены профили функций-ограничителей Чакравати—Ошера и min mod на 10-м шаге для  $\mu = 0.9$ , g = 13. Видно, что на всем интервале решения задачи на данный момент времени функция-ограничитель min mod обращается в нуль только в граничных точках (функция-ограничитель Чакравати—Ошера — в четырех точках). В этих точках "работает" схема первого порядка, в остальных — схема повышенного порядка. В граничных точках для вычисления ограничых интервалов, т. е. полагается  $J_{g,-1/2} = J_{g,1/2}$ ,  $J_{g,I+1/2} = J_{g,I-1/2}$ , поэтому работает всегда схема первого порядка.

При выходе на стационарный режим численное решение в плоской геометрии можно сравнить с аналитическими решениями по формулам, полученным из разложения резольвенты оператора переноса в ряд Неймана:

$$T \approx \begin{cases} \sqrt[7]{1 - 0,00659 (r - r_0)} & \text{в области 1;} \\ \sqrt[7]{5,8683 - 2,44 (r - r_0)} & \text{в области 2;} \\ \sqrt[7]{0,00659 (4 + r_0 - r)} & \text{в области 3.} \end{cases}$$

На рис. 3 приведены профили температуры вещества, рассчитанные по разным схемам и аналитическим формулам в плоской геометрии. Видно, что температура вещества, полученная из численных расчетов по TVD-схеме с ограничителем Чакравати—Ошера, лучше всех согласуется с аналитической формулой.

В табл. 1—3 приведены результаты исследований зависимости метода PSAC от шагов по времени, пространству и константы сходимости внешних итераций.





Рис. 3. Профили температуры вещества: --- TVD-схема с ограничителем min mod; — TVD-схема с ограничителем Чакравати-Ошера; --- St-схема; — точное решение

Таблица 1 Среднее число внешних итераций за 20 временных шагов при расчете на неравномерной сетке

Схема	$\varepsilon_{\rm cx} = 0,0001$	$\varepsilon_{ m cx} = 0,00001$	$\varepsilon_{\rm cx} = 0,000001$
St	3,45	4,25	5,20
TVD с ограничителем min mod	3,45	4,25	$5,\!15$
TVD с ограничителем Чакравати—Ошера	3,50	4,30	$^{5,20}$

Таблица 2

Среднее число внешних итераций на разных временных шагах при расчете на неравномерной сетке,  $\varepsilon_{\rm cx}=0,0001$ 

Схема	$ au=10^{-11}\mathrm{c}$	$\tau = 10^{-12} \mathrm{c}$	$\tau = 10^{-13} \mathrm{c}$
St	$^{3,3}$	$^{2,5}$	2
TVD с ограничителем min mod	$^{3,3}$	$^{2,5}$	2
TVD с ограничителем Чакравати-Ошера	$^{3,3}$	$^{2,5}$	2

Таблица 3

Среднее число внешних итераций за 20 временных шагов при расчете на равномерных сетках с шагом h

Метод	$h = 0.08 \ (I = 50)$	$h = 0.04 \ (I = 100)$	$h = 0.027 \ (I = 150)$
PSAC	2,9	$^{3,2}$	3,3
ВДЭ	4,9	7	$^{8,9}$
Простая итерация	152	216	258

В табл. 1 приведено среднее число внешних итераций за 20 первых временных шагов с различными константами сходимости  $\varepsilon_{\rm cx}$  при  $\tau = 10^{-11}$  с на неравномерной сетке. Число внутренних итераций на обоих этапах составляет приблизительно 2—3 на одной внешней итерации. Видно, что все схемы сходятся быстро и примерно с одинаковой скоростью. Скорость сходимости слабо зависит от константы. При уменьшении константы сходимости на порядок среднее число итераций увеличивается на 1.

В табл. 2 приведено среднее число внешних итераций на различных временных шагах, с которыми велся счет на неравномерной сетке до  $t = 10^{-10}$  с, при константе сходимости  $\varepsilon_{\rm cx} = 0,0001$ . Видно, что зависимость метода ускорения от временного шага слабая.

В табл. 3 приведено среднее число внешних итераций за 20 первых временных шагов при счете на равномерных сетках с числом ячеек (I) 50, 100, 150 при  $\tau = 10^{-11}$  с,  $\varepsilon_{cx} = 0,0001$  для TVD-схемы с ограничителем Чакравати—Ошера. Для сравнения в таблице приведены результаты с использованием метода ВДЭ [3] и метода простой итерации.

Видно, что при увеличении числа точек в 3 раза число внешних итераций в методе PSAC возрастает в 1,2 раза, в методе ВДЭ — в 1,8 раза, в методе простой итерации — в 1,7 раза. Это означает, что зависимость метода PSAC от размера шага более слабая. В то же время зависимость времени счета от числа ячеек в методе PSAC более сильная, что связано с квадратичной зависимостью времени обращения матрицы от числа точек. По-видимому, без распараллеливания по числу точек этот метод может стать экономически неэффективным.

В табл. 4 приведен порядок сходимости схем на трех сгущающихся сетках (40 интервалов и 20 шагов с  $\tau = 2 \cdot 10^{-11}$  с, 80 интервалов и 40 шагов с  $\tau = 10^{-11}$  с, 160 интервалов и 80 шагов с  $\tau = 5 \cdot 10^{-12}$  с) на момент времени  $t = 4 \cdot 10^{-10}$  с, получаемый в  $L_1$ -норме по формуле

$$\delta = \log_2 \frac{\|T_h - T_{h/2}\|}{\|T_{h/2} - T_{h/4}\|},$$

где  $\|T_h - T_{h/2}\|_{L_1} = \sum_{i=1}^M |T_{i+1/2} - T(r_{i+1/2})| (r_{i+1} - r_i), T_{i+1/2}$  — температура на сетке с шагом h,  $T(r_{i+1/2}) = \frac{T(r_{k+1/2}) + T(r_{k-1/2})}{2}$  — усредненная температура из двух соседних ячеек на сетке с шагом h/2.

Порядок сходимости в табл. 4 приведен для двух вариантов задачи Флека. В варианте 1 рассматривается задача, описанная выше. В варианте 2 рассматривается та же задача с одинаковым коэффициентом поглощения  $\alpha_c = \frac{27 \left(1 - e^{-\varepsilon/T}\right)}{\varepsilon^3}$  во всех областях. Видно, что в обеих задачах сходимость TVD-схем лучше, чем сходимость St-схемы.

Таблица 4

Порядок сходимости схем при расчете на сгущающихся сетках двух вариантов задачи Флека

Схема	Вариант 1	Вариант 2	
St	0,61	0,95	
TVD с ограничителем min mod	$0,\!94$	1,37	
TVD с ограничителем Чакравати-Ошера	$1,\!30$	$1,\!26$	

В заключение следует отметить, что в построенной TVD-схеме удалось сохранить важное достоинство  $DS_n$ -метода, когда для решения разностных уравнений используется экономичный метод бегущего счета. Новая схема также сочетает в себе консервативность, улучшенную монотонность за счет применения TVD-реконструкции и повышенный порядок аппроксимации по пространству.

#### Список литературы

- 1. Годунов С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Мат. сборник. 1959. Вып. 3, № 47. С. 271—306.
- 2. Larsen E. W. Unconditionally stable diffusion-synthetic acceleration methods for the slab geometry discrete ordinates equations // Nucl. Sci. and Eng. 1982. Vol. 82. P. 47–70.
- 3. Гаджиев А. Д., Завъялов 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. Гаджиев А. Д., Завъялов В. В., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к  $DS_n$ -методу решения уравнения переноса теплового излучения в осесимметричной RZ-геометрии // Там же. 2010. Вып. 2. С. 30—39.
- 5. *Трощиёв В. Е.* Решение кинетического уравнения и уравнения квазидиффузии по согласованным разностным схемам // Численные методы решения задач математической физики. М.: Наука, 1966. С. 177—185.
- McCoy D. R., Larsen E. W. Unconditionally stable diffusion synthetic acceleration methods for the slab geometry discrete-ordinates equations. Part II: Numerical results // Nucl. Sci. and Eng. 1982. Vol. 82. P. 64.
- Дибиров О. А., Елесин В. А., Трощиёв В. Е., Юдинцев В. Ф. Метод численного решения сферически-симметричных спектральных задач переноса теплового излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1978. Вып. 1. С. 10—17.
- 8. Грошев Е. В. О применении метода Райбики к процессу решения системы уравнений переноса излучения итерациями по граничным условиям // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 1. С. 39—47.
- 9. Грошев Е. В. Об одном методе ускорения сходимости итераций для численного решения одномерного нестационарного уравнения переноса излучения в многогрупповом кинетическом приближении // Там же. 1992. Вып. 1. С. 67—72.
- 10. Fleck J. F., Cummings J. D. An implicit Monte-Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 8(3). P. 313-342.
- 11. Osher S., Chakravarthy S. High resoultion schemes and the entropy condition // SIAM J. Numer. Anal. 1984. Vol. 21(5). P. 955—984.

Статья поступила в редакцию 30.07.12.

УДК 519.6:536.71

#### СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КВАЗИДИФФУЗИОННОГО ПОДХОДА И МЕТОДА УСРЕДНЕННЫХ КОСИНУСОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ

#### А. С. Исакова, Н. Г. Карлыханов (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск)

На примере расчета задач, имеющих аналитическое решение, проведено исследование свойств решений кинетического уравнения, полученных методом квазидиффузии и методом усредненных косинусов. Показано, что метод усредненных косинусов может давать менее точный результат по сравнению с квазидиффузионным подходом. На основе проведенного анализа предлагается способ комбинирования методов усредненных косинусов и квазидиффузии, когда в каждой точке пространства автоматически выбирается тот подход, который дает наибольшую точность.

Ключевые слова: перенос излучения, квазидиффузия, TVD-подход, одномоментные уравнения переноса с усредненными косинусами.

#### Введение

В работе рассматриваются два подхода для расчета переноса излучения, основанные на усреднении кинетического уравнения по угловой переменной, а именно квазидиффузионный подход [1, 2] и метод усредненных косинусов [3]. Как правило, всегда найдется такой класс задач, на котором тот или иной метод проявит свои отрицательные свойства.

Например, согласно теореме Годунова для квазидиффузионного метода невозможно построить линейную монотонную схему второго порядка аппроксимации по какой-либо переменной. Построение TVD-схем затруднено необходимостью записи уравнений квазидиффузии в инвариантах, что представляет определенные трудности даже в одномерном случае [4].

Для метода усредненных косинусов может возникнуть случай, при котором коэффициенты усредненных косинусов терпят разрыв как в пространстве, так и во времени, в то время как коэффициенты квазидиффузии имеют непрерывный характер. Разрывность коэффициентов усредненных косинусов оказывает влияние на точность получаемого решения.

Для повышения точности предлагается комбинировать методы усредненных косинусов и квазидиффузии.

#### 1. Постановка задачи

Коротко рассмотрим суть исследуемых подходов. Для простоты возьмем кинетическое уравнение переноса излучения в сферически-симметричном одномерном случае без учета движения (плотность среды положим равной единице):

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I}{\partial t} + \frac{\partial \left(\mu r^2 I\right)}{r^2 \partial r} + \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{1-\mu^2}{r}I\right) + \left(\kappa_a + \kappa_s\right)I = Q + \kappa_s \int_{-1}^{1} Id\mu.$$
(1)

Здесь введены стандартные обозначения: I — интенсивность излучения;  $\kappa_a$ ,  $\kappa_s$  — коэффициенты поглощения и рассеяния излучения соответственно;  $\mu$  — косинус угла полета фотона относительно

нормали к поверхности сферы; c — скорость света; Q — изотропный источник излучения; r — пространственная координата.

Уравнение (1) дополняется начальными условиями, вид которых несущественен для дальнейшего изложения, и граничными условиями двух видов:

- 1)  $I(r_{left}, \mu > 0) = f_{left}(\mu, t)$  на левой границе,  $I(r_{right}, \mu < 0) = f_{right}(\mu, t)$  на правой границе, где  $f_{left}(\mu, t), f_{right}(\mu, t)$  заданные функции;
- 2) условиями симметрии  $I(r_{left}, \mu) = I(r_{left}, -\mu)$  на левой границе,  $I(r_{right}, \mu) = I(r_{right}, -\mu)$  на правой границе.

Рассмотрим квазидиффузионный подход. Если проинтегрировать уравнение (1) дважды, сначала с весом 1, затем с весом  $\mu$ , то получится следующая система уравнений:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial r^2 S}{r^2 \partial r} + c\kappa_a U = c2Q; \tag{2}$$

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial(DU)}{\partial r} + \frac{3D-1}{r}U + c^{-1}\left(\kappa_a + \kappa_s\right)S = 0.$$
(3)

Здесь введены обозначения:

$$U = \frac{1}{c} \int_{-1}^{1} Id\mu; \qquad S = \int_{-1}^{1} \mu Id\mu; \qquad D = \frac{\int_{-1}^{1} \mu^2 Id\mu}{\int_{-1}^{1} Id\mu}.$$

Система уравнений (2), (3) является системой уравнений квазидиффузии, которая дополняется граничными условиями вида

$$S = \alpha_s U + \beta_s,\tag{4}$$

где

$$\alpha_s = \frac{\int\limits_{-1}^{0} \mu I d\mu}{\int\limits_{-1}^{1} I d\mu}; \qquad \beta_s = \int\limits_{0}^{1} \mu f(\mu, t) d\mu.$$

Условие (4) задается как на левой, так и на правой границе.

Введя обозначение

$$\langle \mu \rangle = \frac{S}{cU},$$

уравнение (2) можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial r^2 \langle \mu \rangle cU}{r^2 \partial r} + c\kappa_a U = 2Q, \tag{5}$$

где  $\langle \mu \rangle$  — коэффициент усредненных косинусов направления полета фотонов.

Уравнение (5) дополняется граничными условиями следующего вида:  $U_{left} = \frac{1}{c} \int_{0}^{1} f_{left}(\mu, t) d\mu$ на левой границе, если  $\langle \mu \rangle > 0$ , в противном случае граничное условие не задается;  $U_{right} = \frac{1}{c} \int_{-1}^{0} f_{right}(\mu, t) d\mu$  на правой границе, если  $\langle \mu \rangle < 0$ , в противном случае граничное условие не задается. При задании на границах условия симметрии полагаем в граничных точках  $\langle \mu \rangle = 0$ .

Разностная аппроксимация и методы решения системы уравнений (2), (3) приведены в работе [2], а уравнения (5) — в работе [3]. В настоящей работе для аппроксимации производной по времени применялась трехслойная разностная схема [5]:

$$\frac{\partial I}{\partial t} \approx \frac{I^{n+1} - I^b}{\alpha\left(\tau\right)},$$

где

$$I^{b} = \beta(\tau) \left( I^{n} - I^{n-1} \right) + I^{n}; \quad \alpha(\tau) = \frac{\left( \tau^{n+1} + \tau^{n} \right) \tau^{n+1}}{2\tau^{n+1} + \tau^{n}} p + (1-p) \tau^{n+1}; \quad \beta(\tau) = \frac{\left( \tau^{n+1} \right)^{2}}{\tau^{n} \left( 2\tau^{n+1} + \tau^{n} \right)} p^{n+1}$$

Здесь  $\tau^{n+1}$ ,  $\tau^n$  — шаги по времени на (n+1)-м и *n*-м временных слоях; p — признак слойности схемы  $(p = 1 - \text{схема трехслойная второго порядка аппроксимации; <math>p = 0$  — схема двухслойная первого порядка аппроксимации). Трехслойная схема достаточно редко используется в практических расчетах из-за своих немонотонных свойств, но в сочетании с TVD-подходом вполне себя оправдывает.

#### 2. Постановка расчетов

Были рассмотрены три методические задачи, имеющие аналитическое решение\*.

Задача 1. Распространение изотропного излучения от границ системы в вакууме. Рассмотрим задачу о распространении излучения в плоской геометрии в непоглощающей и нерассеивающей среде ( $\kappa_a = \kappa_s = 0$ ), положив скорость света равной единице (c = 1). В начальный момент времени интенсивность излучения во всей системе равна нулю.

Данная задача имеет следующее аналитическое решение:

- при  $r_l + ct < r_r - ct$ 

$$\begin{split} U\left(r,t\right) &= U_{0}\left(1-\mu_{0}\right), \quad D\left(r,t\right) = \frac{1}{3}\frac{\left(1-\mu_{0}^{3}\right)}{\left(1-\mu_{0}\right)}, \quad \left\langle\mu\right\rangle\left(r,t\right) = \frac{1}{2}\frac{\left(1-\mu_{0}^{2}\right)}{\left(1-\mu_{0}\right)}, \quad r_{l} < r < r_{l} + ct; \\ U\left(r,t\right) &= 0, \qquad D\left(r,t\right), \quad \left\langle\mu\right\rangle\left(r,t\right) - \text{ решений нет}, \qquad r_{l} + ct < r < r_{r} - ct; \\ U\left(r,t\right) &= U_{0}\left(\mu_{1}+1\right), \quad D\left(r,t\right) = \frac{1}{3}\frac{\left(\mu_{1}^{3}+1\right)}{\left(\mu_{1}+1\right)}, \quad \left\langle\mu\right\rangle\left(r,t\right) = \frac{1}{2}\frac{\left(\mu_{1}^{2}-1\right)}{\left(\mu_{1}+1\right)}, \quad r_{r} - ct < r < r_{r}; \end{split}$$

- при  $r_l + ct \ge r_r - ct$ 

$$\begin{split} U\left(r,t\right) &= U_{0}\left(1-\mu_{0}\right), \quad D\left(r,t\right) = \frac{1}{3}\frac{\left(1-\mu_{0}^{3}\right)}{\left(1-\mu_{0}\right)}, \quad \left\langle\mu\right\rangle\left(r,t\right) = \frac{1}{2}\frac{\left(1-\mu_{0}^{2}\right)}{\left(1-\mu_{0}\right)}, \quad r_{l} < r < r_{r} - ct; \\ U\left(r,t\right) &= U_{0}\left(2+\mu_{1}-\mu_{0}\right), \quad D\left(r,t\right) = \frac{1}{3}\frac{\left(2+\mu_{1}^{3}-\mu_{0}^{3}\right)}{\left(2+\mu_{1}-\mu_{0}\right)}, \quad \left\langle\mu\right\rangle\left(r,t\right) = \frac{1}{2}\frac{\left(\mu_{1}^{2}-\mu_{0}^{2}\right)}{\left(2+\mu_{1}-\mu_{0}\right)}, \\ r_{r} - ct < r < r_{l} + ct; \end{split}$$

$$U(r,t) = U_0(\mu_1 + 1), \quad D(r,t) = \frac{1}{3} \frac{(\mu_1^3 + 1)}{(\mu_1 + 1)}, \quad \langle \mu \rangle(r,t) = \frac{1}{2} \frac{(\mu_1^2 - 1)}{(\mu_1 + 1)}, \quad r_l + ct < r < r_r,$$

где  $\mu_0 = \frac{r - r_l}{ct}; \ \mu_1 = -\frac{r_r - r}{ct}; \ r_l, \ r_r$  — координаты левой и правой границ рассчитываемой системы;  $U_0$  — плотность энергии излучения на границах (задается одинаково).

Расчеты проводились в области  $r_l = 0$ ,  $r_r = 1$  с числом точек по пространству N = 201 и числом точек по угловой переменной M = 64 в двух постановках: с числом Куранта  $k = c\tau/h = 0.5$ , где h — размер счетной ячейки, и k = 2. Задача дополнялась граничными условиями  $f_{left}(\mu, t) = 1$ ;  $f_{right}(\mu, t) = 1$ .

Задача 2. Об остывании плоского слоя, заполненного изотропным излучением. Рассмотрим задачу о распространении излучения в сферической геометрии в непоглощающей и нерассеивающей среде ( $\kappa_a = \kappa_s = 0$ ), положив скорость света равной единице (c = 1). В начальный момент времени интенсивность излучения в системе равна нулю, кроме выделенной области, в которой в начальный момент задано изотропное излучение.

Задача имеет следующее аналитическое решение:

Аналитические решения для задач получены сотрудником РФЯЦ-ВНИИТФ А. В. Вронским.

- при  $r_l + ct < r_r - ct$ 

$$\begin{array}{ll} U\left(r,t\right)=0, & D\left(r,t\right), \ \langle\mu\rangle\left(r,t\right)\ - \ \mathrm{pemehum \, her}, & r < r_l-ct; \\ U\left(r,t\right)=U_0\left(\mu_1+1\right), & D\left(r,t\right)=\frac{1}{3}\frac{\left(\mu_1^3+1\right)}{\left(\mu_1+1\right)}, & \langle\mu\rangle\left(r,t\right)=\frac{1}{2}\frac{\left(\mu_1^2-1\right)}{\left(\mu_1+1\right)}, & r_l-ct < r < r_l+ct; \\ U\left(r,t\right)=U_0, & D\left(r,t\right)=\frac{1}{3}, & \langle\mu\rangle\left(r,t\right)=0, & r_r-ct < r < r_r-ct; \\ U\left(r,t\right)=U_0\left(1-\mu_0\right), & D\left(r,t\right)=\frac{1}{3}\frac{\left(1-\mu_0^3\right)}{\left(1-\mu_0\right)}, & \langle\mu\rangle\left(r,t\right)=\frac{1}{2}\frac{\left(1-\mu_0^2\right)}{\left(1-\mu_0\right)}, & r_l+ct < r < r_r+ct; \\ U\left(r,t\right)=0, & D\left(r,t\right), \ \langle\mu\rangle\left(r,t\right)\ - \ \mathrm{pemehum \, her}, & r > r_r+ct; \end{array}$$

– при  $r_l + ct > r_r - ct$ 

$$\begin{array}{ll} U\left(r,t\right)=0, & D\left(r,t\right), & \left<\mu\right>\left(r,t\right) - \text{ решений нет}, & r < r_l + ct; \\ U\left(r,t\right)=U_0\left(\mu_1+1\right), & D\left(r,t\right)=\frac{1}{3}\frac{\left(\mu_1^3+1\right)}{\left(\mu_1+1\right)}, & \left<\mu\right>\left(r,t\right)=\frac{1}{2}\frac{\left(\mu_1^2-1\right)}{\left(\mu_1+1\right)}, & r_l - ct < r < r_r - ct; \\ U\left(r,t\right)=U_0\left(2+\mu_1-\mu_0\right), & D\left(r,t\right)=\frac{1}{3}\frac{\left(2+\mu_1^3-\mu_0^3\right)}{\left(2+\mu_1-\mu_0\right)}, & \left<\mu\right>\left(r,t\right)=\frac{1}{2}\frac{\left(\mu_1^2-\mu_0^2\right)}{\left(2+\mu_1-\mu_0\right)}, & r_r - ct < r < r_l + ct; \\ \end{array}$$

$$\begin{split} U\left(r,t\right) &= U_{0}\left(1-\mu_{0}\right), \quad D\left(r,t\right) = \frac{1}{3}\frac{\left(1-\mu_{0}^{3}\right)}{\left(1-\mu_{0}\right)}, \quad \left\langle\mu\right\rangle\left(r,t\right) = \frac{1}{2}\frac{\left(1-\mu_{0}^{2}\right)}{\left(1-\mu_{0}\right)}, \quad r_{l}+ct < r < r_{r}+ct; \\ U\left(r,t\right) &= 0, \qquad \qquad D\left(r,t\right), \quad \left\langle\mu\right\rangle\left(r,t\right) - \text{ решений нет}, \qquad r > r_{r}+ct, \end{split}$$

где  $\mu_0 = \frac{r - r_l}{ct}; \ \mu_1 = -\frac{r_r - r}{ct}; \ r_l, \ r_r$  — координаты области, где в начальный момент времени задано изотропное излучение с плотностью энергии  $U_0$ .

Рассчитывалась система единичной длины, в выделенной области [0,4;0,6] была задана начальная изотропная интенсивность излучения с плотностью энергии  $U_0 = 1$ . Задача рассчитывалась с числом точек по пространству N = 201 и числом точек по угловой переменной M = 64 в двух вариантах: с числом Куранта k = 0,5 и k = 2. Задача дополнялась граничными условиями  $f_{left}(\mu, t) = 0$ ;  $f_{right}(\mu, t) = 0$ .

Задача 3. Об остывании сферы, заполненной изотропным излучением. Рассмотрим задачу о распространении излучения в сферической геометрии в непоглощающей и нерассеивающей среде ( $\kappa_a = \kappa_s = 0$ ), положив скорость света равной единице (c = 1). В сферической области 0 < r < 3 в начальный момент времени в подобласти  $0 < r < r_0 = 1$  задано изотропное излучение с единичной плотностью энергии.

Данная задача имеет следующее аналитическое решение:

- при  $r_0 - ct > 0$ 

$$\begin{split} U(r,t) &= U_0, & D(r,t) = \frac{1}{3}, \quad \langle \mu \rangle (r,t) = 0, & 0 < r < r_0 - ct; \\ U(r,t) &= 0.5U_0 \left( \mu_0 + 1 \right), \quad D(r,t) = \frac{1}{3} \left( \mu_0^2 - \mu_0 + 1 \right), \quad \langle \mu \rangle (r,t) = \frac{1}{2} \left( 1 - \mu_0 \right), \\ r_0 - ct < r < r_0 + ct; \end{split}$$

 $U\left(r,t
ight)=0,$   $D\left(r,t
ight),$   $\left\langle \mu
ight
angle \left(r,t
ight)$  — решений нет,  $r>r_{0}+ct;$ 

- при  $r_0 - ct < 0$ 

$$egin{aligned} U\left(r,t
ight) &= 0, & D\left(r,t
ight), \ \left\langle \mu 
ight
angle\left(r,t
ight) &- \ ext{pemehum het}, & 0 < r < ct - r_{0}; \\ U\left(r,t
ight) &= 0,5U_{0}\left(\mu_{0}+1
ight), & D\left(r,t
ight) &= rac{1}{3}\left(\mu_{0}^{2}-\mu_{0}+1
ight), & \left\langle \mu 
ight
angle\left(r,t
ight) &= rac{1}{2}\left(1-\mu_{0}
ight), & ct - r_{0} < r < r_{0} + ct; \\ & U\left(r,t
ight) &= 0, & D\left(r,t
ight), \ \left\langle \mu 
ight
angle\left(r,t
ight) &- \ ext{pemehum het}, & r > r_{0} + ct, \end{aligned}$$

где  $\mu_0 = rac{r_0^2 - r^2 - c^2 t^2}{2rct}.$ 

Расчеты проводились с числом точек по пространству N = 300 и числом точек по угловой переменной M = 64 в двух постановках: с числом Куранта k = 0,5 и k = 2. Задача дополнялась граничными условиями  $I(r_{left}, \mu) = I(r_{left}, -\mu); f_{right}(\mu, t) = 0.$ 

Все задачи на каждом временном шаге рассчитывались в два этапа.

На первом этапе для получения коэффициентов усредненных косинусов и коэффициентов квазидиффузии численно решалось уравнение (1) в двух вариантах:

- 1) по схеме 1-го порядка аппроксимации по времени, пространству и угловой переменной (схема 1t\_1h);
- 2) по трехслойной схеме 2-го порядка аппроксимации по времени и по TVD-схеме как по пространству, так и по угловой переменной с ограничителем Чакравати—Ошера [6] (схема 2t\_2h).

На втором этапе выполнялся один из следующих расчетов:

- уравнения для коэффициентов усредненных косинусов (5) по трехслойной схеме 2-го порядка аппроксимации по времени и по TVD-схеме по пространству с ограничителем Чакравати— Ошера (схема 2t\_2h, SMU);
- уравнений квазидиффузии (2), (3) по трехслойной схеме 2-го порядка аппроксимации по времени и пространству (схема 2t\_2h, KD);
- комбинации уравнений для коэффициентов усредненных косинусов и квазидиффузии по схеме 2-го порядка аппроксимации по времени и пространству (схема 2t\_2h, SMU+KD).

С целью исследования предлагаемых методов вышеприведенные задачи 1—3 решались в следующих постановках, при которых рассчитывались:

- кинетическое уравнение по схеме 1-го порядка по пространству, угловой переменной и времени; уравнение с коэффициентами усредненных косинусов — по схеме 2-го порядка по времени и пространству;
- 2) кинетическое уравнение по схеме 1-го порядка по пространству, угловой переменной и времени; уравнение квазидиффузии — по схеме 2-го порядка по времени и пространству;
- кинетическое уравнение по схеме 2-го порядка по пространству, угловой переменной и времени; уравнение с коэффициентами усредненных косинусов — по схеме 2-го порядка по времени и пространству;
- 4) кинетическое уравнение по схеме 2-го порядка по пространству, угловой переменной и времени; уравнение квазидиффузии — по схеме 2-го порядка по времени и пространству;
- 5) кинетическое уравнение по схеме 2-го порядка по пространству, угловой переменной и времени; комбинация уравнений для коэффициентов усредненных косинусов и квазидиффузии по схеме 2-го порядка по времени и пространству.

В качестве критерия точности выбрано отклонение численного решения от точного в норме  $L_2$ , рассчитанное по формуле

$$\|\Delta R\|_{L_2} = \frac{\sqrt{\int\limits_{r_l}^{r_r} (R_a - R_c)^2 dr}}{\int\limits_{r_l}^{r_r} |R_a| dr} \cdot 100\%,$$
(6)

где  $R_a$  — аналитическое решение;  $R_c$  — численное решение;  $r_l$ ,  $r_r$  — координаты границ рассчитываемой системы.

Результаты всех расчетов приводятся в разд. 4.

### 3. Исследование на модельных задачах точности вычисления коэффициентов усредненных косинусов и коэффициентов квазидиффузии

На рис. 1—6 (см. также цветную вкладку) представлены профили коэффициентов квазидиффузии и усредненных косинусов для всех рассматриваемых задач (слева — для одной постановки из разд. 2, справа — для другой) на разные моменты времени и при разных значениях числа Куранта.

Как следует из табл. 1, для расчета коэффициентов предпочтительнее использовать схему второго порядка аппроксимации по времени, пространству и угловой переменной. Точность вычисления



Таблица 1

Отклонения (%) коэффициентов квазидиффузии и усредненных косинусов от аналитического решения

-	Зада	ча 1,	Зада	ча 2,			Зада	ача З			
Постановка	ct =	= 0,5	ct =	0,25	ct =	- 0,5	ct :	= 1	ct =	- 1,5	
	D	$\langle \mu \rangle$	D	$\langle \mu \rangle$	D	$\langle \mu \rangle$	D	$\langle \mu \rangle$	D	$\langle \mu \rangle$	
$1t_1h, k = 0.5$	4,2169	$26,\!52$	9,8847	6,1467	3,3823	2,1422	1,7699	10,393	3,9281	2,7025	
$1t_1h, k = 2$	6,5305	$31,\!493$	$14,\!686$	$8,\!5467$	$4,\!6506$	$2,\!9867$	2,8155	12,84	5,9188	$3,\!8795$	
$2t_2h, k = 0.5$	1,9526	$11,\!533$	$1,\!1891$	1,08	$1,\!4646$	$^{0,4}$	1,5889	6,3533	1,3311	$0,\!3978$	
$2t_2h, k = 2$	2,7238	$18,\!947$	5,8862	3,92	$2,\!3555$	$1,\!8577$	2,8485	$10,\!233$	1,8838	$1,\!1551$	





Рис. 3. Задача 2. Профили коэффициентов квазидиффузии, ct = 0,25; k = 0,5: — аналитическое решение; — постановка 2; — постановка 4





Рис. 5. Задача 3. Профили коэффициентов квазидиффузии, k = 0.5: 1 - ct = 0.5; 2 - ct = 1; 3 - ct = 1.5; — аналитическое решение; — постановка 2; — постановка 4



Рис. 6. Задача 3. Профили коэффициентов усредненных косинусов, k = 0,5: 1 - ct = 0,5; 2 - ct = 1; 3 - ct = 1,5; — аналитическое решение; – – постановка 1; – – постановка 3

коэффициентов усредненных косинусов, как правило, выше, чем точность вычисления коэффициентов квазидиффузии, за исключением случаев, когда первые претерпевают разрыв (задача 1 — см. рис. 1, 2; задача 3 при ct = 1 -см. рис. 6).

Задача 3 при ct = 1 характеризуется тем, что коэффициент усредненных косинусов в окрестности центральной точки скачком меняется от 0 до 1/2.

### 4. Исследование на модельных задачах точности решений, полученных методами усредненных косинусов и квазидиффузии

На рис. 7—12 (см. также цветную вкладку) представлены профили плотности энергии, полученные для всех вышеуказанных задач в постановках 1—4 из разд. 2 (для постановок 1, 2 графики слева, для постановок 3, 4 — справа) с различными значениями числа Куранта. Как видно из рисунков, квазидиффузионный подход может проявлять сильные немонотонные свойства, в то время как по методу усредненных косинусов получается более монотонное решение.

Из табл. 2 видно, что для задачи 1 метод усредненных косинусов (SMU) дает менее точный результат, чем метод квазидиффузии (KD). Это обусловлено тем, что коэффициенты усредненных





Таблица 2

Отклонение (%) расчетной плотности энергии излучения от аналитического решения в норме  $L_2$  (6)

	Зад	ача 1,	Задача 2,		и 2, Задача 3					
Постановка	ct =	= 0,75	ct =	$0,\!25$	ct =	: 0,5	ct =	= 1	ct =	1,5
	KD	SMU	KD	SMU	KD	SMU	KD	SMU	KD	SMU
$1t_1h - 2t_2h^*, k = 0.5$	4,925	$14,\!614$	31,09	8,658	5,352	$1,\!849$	$14,\!427$	2,553	141,41	7,26
$1t_1h - 2t_2h, k = 2$	5,181	$17,\!01$	37,765	$10,\!459$	$5,\!641$	2,706	$18,\!668$	4,052	$51,\!162$	12,87
$2t_2h - 2t_2h, k = 0.5$	0,901	3,263	19,784	1,094	$2,\!524$	0,347	$11,\!557$	$10,\!264$	$47,\!242$	$1,\!452$
$2t\_2h-2t\_2h,k=2$	2,853	$2,\!913$	$25,\!631$	5,433	3,349	$1,\!834$	$17,\!623$	$16,\!550$	$50,\!507$	7,08

\*Первая схема относится к первому этапу счета, вторая — ко второму.







Рис. 11. Задача 3. Профили плотности энергии излучения, k = 0.5: 1 - ct = 0.5; 2 - ct = 1; 3 - ct = 1.5; — аналитическое решение; — — постановка 1; — постановка 2; — — постановка 3; — — постановка 4



Рис. 12. Задача 3. Профили плотности энергии излучения, k = 2: 1 - ct = 0.5; 2 - ct = 1; 3 - ct = 1.5; — аналитическое решение; — — постановка 1; — постановка 2; — — постановка 3; — — постановка 4

косинусов терпят разрыв, а коэффициенты квазидиффузии непрерывны. Поэтому точность вычисления коэффициентов квазидиффузии на порядок выше, чем усредненных косинусов (см. табл. 1). Следовательно, в точках, где коэффициенты усредненных косинусов терпят разрыв, рекомендуется рассчитывать уравнение переноса в квазидиффузионной постановке. В остальных точках в силу немонотонных свойств решения в квазидиффузионной постановке предпочтение следует отдавать методу усредненных косинусов.

В задаче 3 при ct = 1 коэффициенты квазидиффузии вычислялись точнее коэффициентов усредненных косинусов (см. табл. 1), однако решение по квазидиффузионному методу получено с большей ошибкой, чем решение по методу усредненных косинусов. Это обусловлено немонотонностью метода квазидиффузии.

Использование схемы второго порядка аппроксимации для решения кинетического уравнения (1) с целью получения коэффициентов квазидиффузии и (или) усредненных косинусов существенно повышает точность расчета в целом, особенно при использовании метода усредненных косинусов при значениях числа Куранта меньше единицы. При числе Куранта больше единицы данное влияние ослаблено.

Поскольку существуют те точки, в которых предпочтительней рассчитывать задачу в квазидиффузионной постановке, и те, в которых, расчет производится методом усредненных косинусов, предлагается следующий критерий перехода с одной постановки на другую.

Во всем пространстве ищутся точки, где коэффициенты усредненных косинусов меняют знак. Если в точке смены знака слева стоит положительный, а справа отрицательный коэффициент усредненных косинусов (сходящиеся волны), то в ближайшей окрестности этой точки рассчитывается уравнение переноса в квазидиффузионной постановке. Окрестность определяется следующим образом: влево и вправо от точки смены знака проверяется значение коэффициента усредненных косинусов по следующему критерию:

$$|\langle \mu \rangle| < P_1. \tag{7}$$

Если условие (7) выполнено, то в данной точке расчет ведется в квазидиффузионной постановке.

На рис. 13 представлен график отклонения расчетной плотности энергии излучения от точного решения в норме  $L_2$  в зависимости от  $P_1$ . Коэффициенты квазидиффузии и усредненных косинусов для приведенного расчета вычислялись по схеме второго порядка аппроксимации по времени, пространству и угловой переменной. Видно, что при определенном значении  $P_1$  (0,2 <  $P_1$  < 0,3) точность решения при комбинировании уравнения с усредненными косинусами и уравнения квазидиффузии выше, чем точность решения, полученного из уравнения квазидиффузии или уравнения с усредненными косинусами в отдельности.

В табл. 3 приведен практический порядок аппроксимации, который рассчитывался по формуле

$$\delta = \log_2 \left( \frac{\|R_{c,n} - R_a\|}{\|R_{c,2n} - R_a\|} \right),\tag{8}$$

где  $R_{c,n}$  — решение, полученное на одинарной сетке;  $R_{c,2n}$  — решение, полученное на сетке, измельченной в два раза по всем переменным.

Рис. 14 (см. также цветную вкладку), представляющий профили плотности энергии, рассчитанные в постановках 3—5 (см. разд. 2), рис. 15, на котором отражена скорость сходимости, а также табл. 3 демонстрируют эффективность введения метода комбинирования уравнений для коэффициентов квазидиффузии и усредненных косинусов для решения задач переноса излучения.



Рис. 13. Задача 1. Отклонение (%) расчетной плотности энергии излучения от точного решения в норме  $L_2$  в зависимости от параметра  $P_1$ ; ct = 0.75; k = 0.5: 1 — уравнение квазидиффузии; 2 — комбинация уравнений для коэффициентов усредненных косинусов и квазидиффузии



Рис. 14. Задача 1. Профили плотности энергии излучения, ct = 0.75; k = 0.5;  $P_1 = 0.2$  (справа — увеличенный фрагмент): — аналитическое решение; — — постановка 3; — — постановка 4; ---- постановка 5

Таблица 3

#### Задача 1. Практический порядок аппроксимации

Постановка	KD	SMU	SMU+KD
$1t_1h - 2t_2h^*, k = 0.5$	0,354	0,359	1,08
$2t_2h - 2t_2h$ , $k = 0.5$	0,636	0,5	1,33

\*Первая схема относится к первому этапу счета, вторая — ко второму.



#### Заключение

На основе проведенного исследования был выявлен класс задач, на котором точность метода усредненных косинусов ниже точности метода квазидиффузии. Предложен алгоритм комбинации вышеуказанных методов, позволяющий увеличить точность получаемого решения. Показано, что сочетание трехслойной разностной схемы по времени и TVD-схемы по пространству не вызывает развития немонотонности, свойственной трехслойной схеме. Для вычисления коэффициентов квазидиффузии и усредненных косинусов рекомендуется использовать схемы второго порядка аппроксимации по времени, пространству и угловой переменной, поскольку это существенно повышает точность решения в целом.

#### Список литературы

- 1. Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1964. Т. 4, № 6. С. 1078—1087.
- 2. Карлыханов Н. Г. Применение метода квазидиффузии для решения задач переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 1. С. 32—38.
- 3. Егорова А. С., Карлыханов Н. Г. Решение кинетического уравнения переноса излучения методом усредненных косинусов // Там же. 2011. Вып. 3. С. 29—38.

- Гаджиев А. Д., Шестаков А. А., Завъялов В. В., Грабовенская С. А. Применение TVD-подхода к решению уравнения переноса теплового излучения квазидиффузионным методом // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 3. С. 3—14.
- 5. Зуев А. И. О трехслойной схеме для численного интегрирования уравнений газодинамики и нелинейного уравнения теплопроводности // Численные методы решения задач математической физики. М.: Наука, 1966. С. 230—236.
- Osher S., Chakravarthy S. High resolution schemes and the entropy condition // SIAM J. Numer. Anal. 1984. Vol. 21(5). P. 955-984.

Статья поступила в редакцию 27.08.12.

УДК 533.9

#### ОБ ОДНОМ СВОЙСТВЕ ДВУХ СИММЕТРИЧНО СХОДЯЩИХСЯ ПЛОСКИХ ВОЛН ТЕРМОЯДЕРНОГО ГОРЕНИЯ

#### К. В. Хищенко, А. А. Чарахчьян (ОИВТ РАН, ВЦ РАН, г. Москва)

Рассматривается одномерная задача об одновременном симметричном воздействии двух одинаковых лазерных импульсов на плоский слой твердого DT-горючего. Исследованы два варианта с разной начальной плотностью смеси: нормальной при атмосферном давлении и в 5 раз больше. Задача ставится для уравнений односкоростной двухтемпературной гидродинамики с учетом электронной и ионной теплопроводности, собственного излучения плазмы и нагрева горючего α-частицами первичной DT-реакции и лазерным излучением, которое полностью поглощается в окрестности точки с критической плотностью.

Исследована динамика сходящихся к плоскости симметрии волн термоядерного горения, возникающих при некотором выборе толщины слоя и параметров лазерного излучения. Показано, что такие волны способны создавать перед собой сжимающий профиль скорости, модуль угла наклона которого по пространственной координате вблизи фронта волны растет со временем, что приводит к быстрому сжатию относительно холодного горючего перед волной.

*Ключевые слова:* управляемый инерционный синтез, волна медленного горения, волна термоядерного горения, течения с линейным профилем скорости.

#### Введение

Известны два подхода к созданию управляемого инерционного синтеза. Первый основан на сжатии мишени одним драйвером, обеспечивающим достаточно высокую плотность и температуру мишени [1]. При этом подходе волна термоядерного горения зарождается внутри мишени. Второй подход, получивший название быстрого поджига (fast ignition), предполагает использование двух драйверов [2, 3]. Первый драйвер сжимает мишень до плотности  $\sim 10^3 \rho_s$ , где  $\rho_s$  — нормальная плотность твердого горючего, а второй быстро поднимает температуру мишени. При таком подходе волна горения зарождается вблизи границы мишени и распространяется внутрь. В качестве источника нагрева высокоплотного горючего рассматриваются быстрые электроны [3] и протоны [4—6], генерируемые поглощением лазерного излучения в окрестности точки с критической плотностью, а также пучки тяжелых ионов [7, 8]. Как оценки, так и результаты численного моделирования показывают возможность получения идущей вглубь мишени волны горения при определенных параметрах лазерного излучения или пучка ионов.

Целью настоящей работы является демонстрация одного важного, на взгляд авторов, свойства двух плоских симметрично сходящихся волн термоядерного горения в случае сравнительно небольших начальных плотностей  $\rho_0 = \rho_s$  и  $\rho_0 = 5\rho_s$ . Рассматривается одномерная задача об одновременном симметричном воздействии двух одинаковых лазерных импульсов на плоский слой DT-горючего [9]. Выбрано достаточно большое значение полуширины слоя H = 5 см, для которого  $H\rho_s \approx 1 \, r/cm^2$ .

Как показали расчеты, в такой задаче можно получить идущую вглубь мишени волну горения в рамках модели полного поглощения лазерного излучения в точке с критической плотностью, т. е.

без учета нагрева горючего надтепловыми частицами, проникающими в область сверхкритической плотности. Для этого надо выбрать достаточно большие мощность  $(5 \cdot 10^{15} \,\mathrm{Br/cm^2})$  и длительность  $(400 \,\mathrm{hc})$  лазерного импульса, чтобы температура ионов в короне достигла значения около двух сотен мегакельвинов (200 MK), и достаточно малую длину волны излучения (0,25 мкм), чтобы плотность в короне была не слишком малой. Отметим также, что во всех расчетах волна горения возникала только после хотя бы одного выхода отраженной от плоскости симметрии ударной волны (УВ) на фронт абляции.

Учет нагрева надтепловыми частицами должен, по-видимому, ослабить ограничения на параметры лазерного излучения, необходимые для возникновения волны горения. Для целей настоящей работы обнаруженная возможность получения волны горения в рамках простейшей модели нагрева лазерным излучением вполне достаточна.

#### Постановка задачи и численный метод

В начальный момент времени t = 0 в области  $0 \le x \le H = 5$  см имеется неподвижный плоский слой смеси дейтерия и трития, взятых в равных количествах. Однотемпературное уравнение состояния (УРС) смеси, связывающее давление p и удельную внутреннюю энергию  $\varepsilon$  с плотностью  $\rho$  и температурой T, строится на основе широкодиапазонного полуэмпирического УРСа водорода [10]  $p = p_{\rm H}(\rho, T), \varepsilon = \varepsilon_{\rm H}(\rho, T)$  по формулам

$$p = p(\rho, T) = p_{\rm H}\left(\frac{\rho}{A}, T\right); \qquad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T) = \frac{1}{A}\varepsilon_{\rm H}\left(\frac{\rho}{A}, T\right),$$
(1)

где A = 2,5 — относительная атомная масса смеси.

Исходная плотность задавалась  $\rho_0 = \rho_s$  или  $\rho_0 = 5\rho_s$ , где  $\rho_s \approx 0.22 \,\mathrm{r/cm^3}$  соответствует твердотельному состоянию DT-смеси при давлении  $p_a = 1$  бар. Если  $\rho_0 = \rho_s$ , то начальное давление в слое  $p_0 = p_a$ , а начальная температура  $T_0 \approx 4 \,\mathrm{K}$  определяется УРСом. Если  $\rho_0 = 5\rho_s$ , то полагается  $T_0 = 300 \,\mathrm{K}$ , а давление  $p_0 \approx 300 \,\mathrm{k}$ бар определяется УРСом.

В точке x = H первоначально находится свободная граница с давлением  $p_a$ , на которую в течение 400 нс действует излучение лазера с постоянной интенсивностью  $J_0 = 5 \cdot 10^{15} \text{ Br/cm}^2$  и длиной волны  $\lambda = 0.25$  мкм. В точке x = 0, которая далее для краткости будет называться *стенкой*, ставится условие симметрии, эквивалентное действию такого же лазера на симметрично расположенный слой смеси.

Учитывается только первичная реакция синтеза ядер дейтерия и трития, в результате которой возникают *α*-частица и нейтрон:

$$D + T \to \alpha(3,5 \,\mathrm{M}\mathfrak{s}B) + N(14 \,\mathrm{M}\mathfrak{s}B). \tag{2}$$

Нейтроны предполагаются вылетающими из горючего без взаимодействия с ним.

Математическая модель основана на уравнениях односкоростной двухтемпературной гидродинамики с учетом электронной и ионной теплопроводности, собственного излучения плазмы и нагрева вещества лазерным излучением и  $\alpha$ -частицами [11]:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \frac{\partial u}{\partial x};\tag{3}$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x};\tag{4}$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial t} = -p_e \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \varkappa_e \frac{\partial T_e}{\partial x} + \frac{3}{2} n_i k_B \frac{T_i - T_e}{\tau_T} + L + R + W_e; \tag{5}$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_i}{dt} = -p_i \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \varkappa_i \frac{\partial T_i}{\partial x} + \frac{3}{2} n_i k_B \frac{T_e - T_i}{\tau_T} + W_i.$$
(6)

Здесь u — скорость;  $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}$  — лагранжева производная по времени;  $p = p_e + p_i$  — полное давление в системе, где  $p_e$ ,  $p_i$  — давление электронов и ионов;  $\varepsilon_e$ ,  $\varepsilon_i$  — удельная внутренняя энергия

электронов и ионов;  $T_e$ ,  $T_i$  — температура электронов и ионов;  $\varkappa_e$ ,  $\varkappa_i$  — коэффициенты электронной [12] и ионной [13] теплопроводности. Третьи слагаемые в правых частях уравнений (5), (6) определяют обмен энергией между электронами и ионами;  $n_i = \rho/(Am_u)$  — концентрация ионов, где  $m_u$  — атомная единица массы;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $\tau_T$  — время релаксации температур [12]. Остальные слагаемые в (5), (6) определяют обмен энергией между компонентами плазмы и лазерным излучением (L), собственным излучением (R) и  $\alpha$ -частицами ( $W_e$  и  $W_i$  для электронов и ионов соответственно). Степень ионизации плазмы, входящая в выражения для коэффициентов  $\varkappa_e$ ,  $\varkappa_i$  и  $\tau_T$ , полагается равной заряду ядер смеси z = 1. В уравнении движения (4) не учитывается давление излучения и передача импульса при торможении  $\alpha$ -частиц. Кроме того, в уравнении неразрывности (3) отсутствуют слагаемые, учитывающие изменение состава плазмы, в которой идет реакция (2).

УРСы, замыкающие систему (3)-(6), имеют вид [14]

$$p_e = \beta p(\rho, T_e), \quad \varepsilon_e = \beta \varepsilon(\rho, T_e), \quad \beta = \frac{z}{1+z};$$
  

$$p_i = (1-\beta)p(\rho, T_i), \quad \varepsilon_i = (1-\beta)\varepsilon(\rho, T_i),$$
(7)

где z = 1 — заряд ионов. В области разреженной плазмы эти уравнения переходят в УРСы идеального газа для электронов и ионов, а в случае равенства температур  $T = T_e = T_i - в$  УРС (1):

$$p = p_e + p_i = p(\rho, T);$$
  $\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_i = \varepsilon(\rho, T).$ 

Количество актов реакции (2) в единице объема за единицу времени [11] равно

$$F_{\rm DT} = n_{\rm D} n_{\rm T} \langle \sigma v \rangle_{\rm DT},$$

где  $n_{\rm D}$  и  $n_{\rm T}$  — концентрации ядер дейтерия и трития;  $\langle \sigma v \rangle_{\rm DT}$  — усредненная по максвелловскому распределению ионов скорость реакции, зависящая от температуры  $T_i$  согласно [15]. Выгорание ядер дейтерия и трития описывается уравнениями

$$\frac{dn_{\rm D}}{dt} = -n_{\rm D}\frac{\partial u}{\partial x} - F_{\rm DT}; \quad \frac{dn_{\rm T}}{dt} = -n_{\rm T}\frac{\partial u}{\partial x} - F_{\rm DT}.$$
(8)

Пусть известна скорость появления термализованных  $\alpha$ -частиц в единице объема  $F_{\alpha} = \left(\frac{dn_{\alpha}}{dt}\right)_{th}$ , где  $n_{\alpha}$  — концентрация  $\alpha$ -частиц. Например, в предположении, что  $\alpha$ -частица термализуется там же, где и родилась,  $F_{\alpha} = F_{\rm DT}$ . Тогда для скорости изменения концентрации  $\alpha$ -частиц имеем

 $\frac{dn_{\alpha}}{dt} = -n_{\alpha}\frac{\partial u}{\partial x} + F_{\alpha}.$ (9)

Теперь можно построить модель, учитывающую изменение плотности и УРСов при изменении состава плазмы. Для рассматриваемой смеси D, T и *α*-частиц можно найти плотность

$$\rho = (A_{\rm D}n_{\rm D} + A_{\rm T}n_{\rm T} + A_{\alpha}n_{\alpha})m_u,\tag{10}$$

среднюю относительную атомную массу

$$A = \frac{A_{\rm D}n_{\rm D} + A_{\rm T}n_{\rm T} + A_{\alpha}n_{\alpha}}{n_{\rm D} + n_{\rm T} + n_{\alpha}} \tag{11}$$

и средний заряд

$$z = \frac{z_{\rm D}n_{\rm D} + z_{\rm T}n_{\rm T} + z_{\alpha}n_{\alpha}}{n_{\rm D} + n_{\rm T} + n_{\alpha}},\tag{12}$$

где  $A_{\rm D} = 2$ ;  $A_{\rm T} = 3$ ;  $A_{\alpha} = 4$ ;  $z_{\rm D} = 1$ ;  $z_{\rm T} = 1$ ;  $z_{\alpha} = 2$  — относительные атомные массы и заряды компонентов смеси. Концентрация электронов  $n_e$  по-прежнему определяется условием электронейтральности  $n_e = z(n_{\rm D} + n_{\rm T} + n_{\alpha})$ . В силу (8)—(10) в правой части уравнения неразрывности (3) появляется дополнительное слагаемое  $[A_{\alpha}F_{\alpha} - (A_{\rm D} + A_{\rm T})F_{\rm DT}]m_u$ . Однотемпературный УРС возьмем в виде

$$p(\rho,T) = \frac{1+z}{2} p_{\rm H}\left(\frac{\rho}{A},T\right); \qquad \varepsilon(\rho,T) = \frac{1+z}{2A} \varepsilon_{\rm H}\left(\frac{\rho}{A},T\right), \tag{13}$$

где A и z определяются формулами (11), (12).

Двухтемпературные УРСы строятся по формулам (7) и (12). В области разреженной плазмы полученные таким образом уравнения переходят в УРСы идеального газа смеси ионов (со средней относительной атомной массой A и средним зарядом z) и электронов.

Рассматриваются две модели нагрева вещества  $\alpha$ -частицами: простейший локальный нагрев в точке, где  $\alpha$ -частица родилась, и приближение *вперед*—назад стационарного кинетического уравнения Фоккера—Планка [16]. Скорость торможения (отрицательное ускорение)  $\alpha$ -частицы на электронах в полностью ионизованной плазме как функция скорости частицы v, температуры и плотности  $a_e(v, T_e, \rho)$  взята из [17], аналогичная функция для скорости торможения на ионах  $a_i(v, T_i, \rho)$ —из [18].

Локальный нагрев α-частицами описывается формулами

$$W = \frac{m_{\alpha}(v_0^2 - v_{th}^2)}{2} F_{\text{DT}}; \qquad W_e = W \frac{a_{e0}}{a_{e0} + a_{i0}}; \qquad W_i = W \frac{a_{i0}}{a_{e0} + a_{i0}};$$

где  $m_{\alpha}$  и  $v_0 \approx 1,3 \cdot 10^4 \,\mathrm{km/c}$  — масса и начальная скорость  $\alpha$ -частицы;  $a_{e0} = a_e(v_0, T_e, \rho)$ ;  $a_{i0} = a_i(v_0, T_i, \rho)$ ;  $v_{th} = (3k_BT_i/m_{\alpha})^{1/2}$  — скорость, при которой  $\alpha$ -частица термализуется. В рамках этой модели расчеты проводились как с учетом зависимости плотности и УРСов от состава плазмы в соответствии с уравнениями (9)—(13), так и без такого учета, когда изменение состава плазмы влияет только на интенсивность реакции синтеза.

Приближение вперед—назад уравнения Фоккера—Планка строится следующим образом. Вводятся функции  $f^+(x,v)$  и  $f^-(x,v)$  распределения  $\alpha$ -частиц, летящих соответственно вперед и назад, которые определены на интервале  $0 \leq v \leq v_0$  и удовлетворяют уравнениям

$$\frac{v}{2}\frac{\partial f^+}{\partial x} + \frac{\partial af^+}{\partial v} = 0; \qquad \frac{v}{2}\frac{\partial f^-}{\partial x} - \frac{\partial af^-}{\partial v} = 0; \qquad a = a(x,v) = a_e + a_i, \tag{14}$$

для которых ставятся граничные условия при  $v = v_0$  и на границах интервала по x:

$$f^{+}(x,v_{0}) = f^{-}(x,v_{0}) = \frac{F_{\rm DT}}{|a(x,v_{0})|}; \qquad f^{-}(x_{b},v) = 0; \qquad f^{+}(0,v) = f^{-}(0,v),$$

где  $x_b$  — координата свободной границы. Правые части уравнений (5), (6) имеют вид

$$W_e = -\int_{0}^{v_0} \frac{f^+ + f^-}{2} m_\alpha v a_e dv; \qquad W_i = -\int_{0}^{v_0} \frac{f^+ + f^-}{2} m_\alpha v a_i dv.$$

В рамках этой модели зависимость плотности и УРСов от состава плазмы не учитывалась.

Для расчета нагрева лазерным излучением используется формула [15] для полностью ионизованной плазмы:

$$L = \frac{\partial J}{\partial x}, \qquad J = J_0 \exp\left(\int_{x_b}^x \kappa_{ff} \left[1 - \left(\frac{\nu_{pl}}{\nu_L}\right)^2\right]^{-1/2} dx\right), \qquad x_* \leqslant x \leqslant x_b,$$

где  $\kappa_{ff}(\rho, T_e, \nu_L)$  — коэффициент тормозного поглощения [19];  $\nu_{pl}(\rho)$  — плазменная частота;  $\nu_L$  — частота лазера;  $J_0$  — интенсивность падающего лазерного излучения; точка  $x_*$  определяется равенством  $\nu_{pl}(\rho(x_*)) = \nu_L$ .

Собственное излучение плазмы описывается стационарным уравнением переноса в диффузионном приближении по телесному углу [20]. По аналогии с работой [21] учитывается охлаждение электронов за счет обратного комптоновского эффекта на основе известной приближенной формулы [19, 22]:

$$\frac{\partial q_{\nu}}{\partial x} = \kappa_a B(\nu, T_e) - \kappa u_{\nu}; \qquad \frac{1}{3} \frac{\partial u_{\nu}}{\partial x} = -\kappa q_{\nu}; \qquad \kappa = \kappa_a + n_e \sigma_T, \tag{15}$$

где  $\nu$  — частота;  $q_{\nu}$ ,  $u_{\nu}$  — спектральные поток и плотность лучистой энергии;  $B(\nu, T_e)$  — функция Планка;  $\kappa_a = \kappa_a(\rho, T_e, \nu)$  — коэффициент поглощения с учетом индуцированного излучения;  $\sigma_T$  томсоновское сечение рассеяния фотона на свободном электроне. Соответствующее слагаемое в правой части уравнения (5)

$$R = \frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{4\sigma_T n_e U}{m_e c^2} k_B (T_e - T_r), \qquad Q = \int_0^\infty q_\nu d\nu, \qquad U = \int_0^\infty u_\nu d\nu, \tag{16}$$

где  $m_e$  — масса электрона; c — скорость света;  $T_r$  — температура фотонов, которая определяется равенством

$$\int_{0}^{\infty} B(\nu, T_r) d\nu = U.$$

Как будет показано в следующем разделе, высокочастотное излучение плазмы за фронтом головной УВ, генерируемой лазерным импульсом, может существенно нагревать вещество перед УВ. На начальном этапе формирования такого радиационного предвестника высокочастотное излучение поглощается нейтральными атомами изотопов водорода. Поэтому коэффициент поглощения  $\kappa_a$ включает в себя как тормозной механизм поглощения свободными электронами [19], так и механизм связанно-свободного поглощения нейтральными атомами [20]. Для расчета степени ионизации используется модель Саха [20].

Численный метод построен на расщеплении по физическим процессам. Для уравнений гидродинамики используется схема Годунова в переменных Лагранжа первого порядка точности [23]. Для теплопроводности и обмена энергией между электронами и ионами используется неявная по времени схема.

При выполнении расчетов сетка по x содержала от 350 до 1400 узлов, равномерно расставленных по массовой координате  $s = \int_0^x \rho(x') dx'$ .

Число узлов сетки по скорости  $\alpha$ -частицы v для уравнений (14) менялось от 20 до 40. Минимальное значение скорости соответствует термализации при температуре ионов 5 MK. Для расчета уравнений (14) используется схема бегущего счета.

Сетка по частоте  $\nu$ , для узлов которой решаются уравнения (15), занимала диапазон от 4 до 8 десятичных порядков. Число узлов на один десятичный порядок менялось от 20 до 5. Интегрирование по частоте в (16) выполняется по формуле трапеций.

#### Результаты расчетов

Начнем с варианта  $\rho_0 = \rho_s$ . Давление головной УВ, идущей от фронта абляции внутрь мишени, равно ~ 300 Мбар. Решение задачи о распаде разрыва для уравнений гидродинамики дает температуру в отраженной от стенки волне ~ 12,5 МК, что близко к порогу зажигания смеси дейтерия и трития. Поэтому может показаться, что при заданных параметрах проще всего получить волну термоядерного горения вблизи стенки в отраженной УВ. На самом деле это не так.

На рис. 1 показаны распределения температуры и скорости по массовой координате в четыре последовательных момента времени. Отрицательные значения скорости соответствуют движению вещества к стенке, положительные значения — наоборот. Температура в короне, где электронная и ионная температуры отличаются друг от друга и намного превышают температуру в отраженной волне, как и большие положительные скорости в короне, здесь не показаны. В моменты 1 и 2 УВ еще не дошла до стенки. Видно, что за фронтом волны температура уменьшается по мере увеличения расстояния до фронта, а перед фронтом волны возникает предвестник. Такое поведение температуры обусловлено собственным излучением плазмы, которое охлаждает вещество за фронтом и прогревает перед ним.

Обратим внимание на момент 3 (см. рис. 1), в который хорошо видна отраженная УВ, движущаяся от стенки. Температура за отраженной волной оказывается сильно неоднородной по массовой координате. Скорость за этой волной не равна нулю, как было бы без учета собственного излучения плазмы, а имеет линейный профиль, характерный для известного решения уравнений гидродинамики, полученного и исследованного в свое время Л. И. Седовым [24]. Как следует из уравнения неразрывности (3), такой профиль скорости приводит к экспоненциальному росту плотности во времени.

Это нетрудно показать. Пусть скорость имеет вид

$$u(x,t) = \varphi(t)x, \tag{17}$$

который определяет класс решений уравнений гидродинамики, найденный Л. И. Седовым [24]. В случае сжимающего профиля на рис. 1,  $\delta$ (вблизи стенки в моменты 3 и 4)  $\varphi(t) < 0$ . Пусть также в некоторый момент времени  $t_1$  плотность  $\rho = \rho_1$  не зависит от x. Тогда из уравнения неразрывности (3) получим

$$\rho(t) = \rho_1 \exp\left(-\int_{t_1}^t \varphi(t')dt'\right).$$

На рис. 2 приведены временные зависимости температуры и плотности на стенке. Температура начинает увеличиваться задолго до прихода на стенку УВ, что связано с ростом температуры в предвестнике. Плотность в это время остается примерно равной своему начальному значению, что указывает на сверхзвуковой характер предвестника, вещество в котором остается неподвижным.

Сразу после прихода головной УВ на стенку температура там поднимается примерно до значения температуры в отраженной УВ, полученной из задачи о распаде разрыва для уравнений гидродинамики. Невозможность возникновения волны термоядерного горения здесь связана с последующим быстрым падением температуры, как это видно из рис. 2. Сравнительный анализ



Рис. 1. Профили температуры (a) и скорости (б) по массовой координате в моменты времени 40 (1), 90 (2), 140 (3) и 150 нс (4) при  $\rho_0 = \rho_s$ : 1, 2 — падающая на стенку УВ; 3, 4 — отраженная УВ

б



Рис. 2. Плотность (——) и температура (——) на стенке в зависимости от времени при  $\rho_0 = \rho_s$ : 1 — приход головной УВ на стенку

значений правых частей в уравнениях (5), (6) показывает, что причиной падения температуры является радиационное охлаждение. Отметим также рост плотности на стенке после прихода на нее УВ вследствие упомянутого выше сжимающего линейного профиля скорости между стенкой и отраженной УВ.
Волнообразный характер приведенных на рис. 2 зависимостей связан с тем, что отраженная от стенки УВ отражается затем от фронта абляции обратно, давая повторный "всплеск" значений термодинамических функций на стенке, и т. д.

Продолжающийся лазерный импульс постоянно повышает температуру плазмы в короне. В результате возникает волна термоядерного горения, идущая от короны внутрь мишени. Существенную роль в образовании такой волны играет, по-видимому, и взаимодействие УВ с фронтом абляции, порождающее движение фронта абляции навстречу лазерному излучению. На рис. 3 приведены профили плотности, ионной температуры и массовой скорости в шесть последовательных моментов времени. Моменты 1—5 показывают движение волны термоядерного горения к стенке, а момент 6 отвечает состоянию после схождения волны на стенке. Видно, что температура перед волной



Рис. 3. Профили плотности (a), ионной температуры (б) и скорости (в) по массовой координате в моменты времени 406 (1), 436 (2), 447 (3), 455 (4), 461 (5) и 584 нс (6) при  $\rho_0 = \rho_s$ : 1—5 — идущая к стенке волна термоядерного горения, 6 — волна горения после отражения от стенки

мала, а плотность примерно постоянна по массовой координате и быстро растет по мере движения волны к стенке.

Как видно из рис. 3, *e*, перед волной возникает течение с линейным по массовой координате *s* профилем скорости, направленной к стенке. В силу примерного постоянства плотности перед волной (см. рис. 3, *a*), профиль скорости по координате *x* также линеен и имеет вид (17), что дает постоянный по пространству рост плотности во времени. В отличие от течения за отраженной УВ на рис. 1, в котором угол  $\operatorname{arctg} \left| \frac{\partial u}{\partial s} \right|$  наклона профиля скорости по *s* уменьшается со временем, этот угол перед волной горения со временем увеличивается. Угол наклона профиля скорости по *x* также увеличивается по модулю, поскольку выполняются соотношения  $\varphi(t) = \frac{\partial u}{\partial x} = \rho \frac{\partial u}{\partial s}$ , а плотность перед волной быстро растет со временем.

Вместе с плотностью перед волной быстро растет и давление. В момент времени, отмеченный на рис. 3 цифрой 5, давление на стенке достигает ~ 3 Гбар. После отражения волны горения от стенки (момент 6) возникает плазма со сравнительно небольшой плотностью и высокой ионной температурой (~  $1 \Gamma K$ ).

Представляет интерес вид функций p(s) и  $W_e(s)$  в окрестности фронта волны горения, где  $W_e$  — скорость изменения энергии электронов из-за нагрева  $\alpha$ -частицами в единице объема, используемая в правой части уравнения (5). Эти функции вместе с функцией  $\rho(s)$  показаны на рис. 4 для момента времени, обозначенного на рис. 3 цифрой 4. Узкая область наиболее интенсивного горения в окрестности максимума функции  $W_e(s)$  и малое изменение давления в области горения являются типичными чертами волны медленного горения [25]. Как известно [25], вследствие дозвуковой скорости распространения такая волна может вызывать движение вещества перед собой. Неудивительно по-

этому, что условие симметрии u = 0 на стенке приводит к профилю скорости (17) с  $\varphi(t) < 0$  и  $\frac{d|\varphi(t)|}{d|\varphi(t)|} > 0.$ 

dt Рис. 5 демонстрирует результаты сравнения расчетов на разных сетках. Показана зависимость максимальной ионной температуры от времени. Видно, что расчеты на сетках с числом узлов n = 700 и n = 1400 отличаются друг от друга намного меньше, чем расчеты на сетках с n = 350 и n = 700. Показанные ранее результаты относятся к сетке с n = 700.

На рис. 6 приведены зависимости от времени коэффициента выгорания F (отношения числа прореагировавших ядер дейтерия и трития к их первоначальному числу) и коэффициента усиления G (отношения энергии вылетевших нейтронов к энергии, затраченной лазером). Напомним, что лазерный импульс заканчивается в момент t = 400 нс. Видно, что в момент t = 800 нс  $F \approx 0.3$ , а  $G \approx 45$ , причем оба коэффициента продолжают расти, так как температура при t = 800 нс остается достаточно большой для того, чтобы термоядерная реакция продолжалась. Модели локального нагрева и приближения вneped-назад для кинетического уравнения Фоккера-Планка дают близкие результаты. Показанные ранее расчетные зависимости относятся к последнему приближению.





Рис. 4. Плотность  $\rho$  (1), давление p (2) и скорость изменения энергии электронов из-за нагрева  $\alpha$ -частицами в единице объема  $W_e$  (---) в зависимости от массовой координаты в момент времени 455 нс при  $\rho_0 = \rho_s$ 



Рис. 5. Максимальная температура ионов в зависимости от времени на сетках с числом узлов 350 (1), 700 (2) и 1 400 (3) при  $\rho_0 = \rho_s$ 

Рис. 6. Коэффициенты усиления G (1) и выгорания F (2) в зависимости от времени для модели локального нагрева  $\alpha$ -частицами (---) и приближения eneped-назад уравнения Фоккера-Планка (----) при  $\rho_0 = \rho_s$ 

В рамках модели локального нагрева расчеты проводились как с учетом зависимости плотности и УРСов от состава плазмы, так и без такого учета, когда изменение состава плазмы влияет только на интенсивность реакции синтеза. В обоих рассмотренных вариантах  $\rho_0 = \rho_s$  и  $\rho_0 = 5\rho_s$  различие было незначительным.

Перейдем к варианту  $\rho_0 = 5\rho_s$  (расчет выполнен на сетке с n = 700). Поскольку абляционное давление слабо зависит от плотности вещества, температура в УВ, идущей от фронта абляции, в этом случае оказывается намного ниже, чем при  $\rho_0 = \rho_s$ . Поэтому возможность получить волну термоядерного горения в отраженной от стенки УВ здесь отсутствует из-за невысокой температуры в отраженной волне. Кроме того, сравнительно низкая температура в УВ существенно уменьшает температуру плазмы в предвестнике, что делает параметры отраженной УВ близкими к классическим, когда скорость за фронтом отраженной волны равна нулю. Колебательный режим течения,



Рис. 7. Профили плотности (*a*), ионной температуры (б) и скорости (*b*) по пространственной координате в моменты времени 587 (1), 599 (2), 601 (3) и 602 нс (4) при  $\rho_0 = 5\rho_s$ : 1—3 — движущаяся к стенке волна термоядерного горения; 4 — отраженная от стенки УВ

возникающий в варианте  $\rho_0 = \rho_s$  (см. рис. 2), здесь отсутствует, так как волна термоядерного горения возникает сразу после первого выхода отраженной УВ на фронт абляции.

На рис. 7 приведены профили плотности, ионной температуры и скорости по координате x в четыре последовательных момента времени. Первые три момента показывают движение волны термоядерного горения к стенке. В последний момент времени видна отраженная УВ, порожденная схождением волны горения на стенке. Как и в случае  $\rho_0 = \rho_s$ , температура перед волной термоядерного горения мала, а сжимающий профиль скорости перед фронтом приводит к быстрому росту плотности по мере движения волны к стенке.

В отличие от случая  $\rho_0 = \rho_s$ , когда плотность перед волной почти не зависит от пространственной координаты, при  $\rho_0 = 5\rho_s$  плотность растет быстро вблизи фронта и медленно вблизи стенки. Причина заключается в том, что из-за большого времени прохождения возмущения от фронта волны до стенки наклон сжимающего профиля скорости вблизи фронта волны растет намного быстрее, чем вблизи стенки. Отметим также, что скорость на фронте волны вблизи стенки примерно на два порядка выше, чем в случае  $\rho_0 = \rho_s$ . В результате плотность горючего перед волной достигает значения  $ρ > 110 \, \Gamma/cm^3 \approx 500 \rho_s$  (см. момент 3 на рис. 7), сравнимого со значением, которое предполагается получать с помощью первого драйвера в рамках концепции быстрого поджига.

Температура за отраженной УВ в последний из приведенных на рис. 7 моментов равна ~ 4 ГК. Скорость за волной направлена от стенки и имеет линейный профиль, что приводит к быстрому падению плотности за волной.

На рис. 8 показана зависимость от времени коэффициента усиления для разных моделей нагрева  $\alpha$ -частицами. Хотя модель локального нагрева дает волну термоядерного горения несколько раньше, чем приближение eneped-hasadдля кинетического уравнения Фоккера—Планка, коэффициент усиления по обеим моделям отличается незначительно и равен ~ 500. Коэффициент выгорания по обеим моделям равен ~ 0,6. Показанные выше результаты для варианта  $\rho_0 = 5\rho_s$  относятся к модели локального нагрева.

## Заключение

Набегающая на плоскость симметрии волна (каждая из двух симметрично сходящихся плоских волн) термоядерного горения обладает интересным свойством создавать перед собой сжимающий профиль скорости, модуль угла наклона которого по пространственной координате вблизи фронта волны растет со временем, что приводит к быстрому сжатию относительно холодного горючего перед волной. Можно ожидать, что таким же свойством обладает сходящаяся волна термоядерного горения в цилиндрической и сферической геометриях.

При начальной полуширине слоя DTгорючего 5 см и начальной плотности  $\rho_0 = 5\rho_s$ горючее перел фронтом волны сжимается ло  $\rho >$ 



Рис. 8. Коэффициент усиления в зависимости от времени для модели локального нагрева α-частицами (1) и приближения *вперед*-назад уравнения Фоккера-Планка (2) при ρ<sub>0</sub> = 5ρ<sub>s</sub>

горючее перед фронтом волны сжимается до  $\rho > 500 \rho_s$ , что сравнимо со значением плотности, которое предполагается получать с помощью первого драйвера в рамках концепции быстрого поджига.

Для рассмотренной модели лазерного нагрева, не учитывающей нагрев надтепловыми частицами, коэффициент усиления по энергии нейтронов DT-реакции равен ~ 45 для варианта  $\rho_0 = \rho_s$  и ~ 500 для варианта  $\rho_0 = 5\rho_s$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 11-08-01225 и 12-01-00130), Президента РФ (грант № НШ-7241.2012.2) и Российской академии наук (программы № 3 ОМН РАН и № 2П Президиума РАН).

## Список литературы

- 1. Lindl J. D., Amendt P., Berger R. L. et al. The physics basis for ignition using indirect-drive targets on the National Ignition Facility // Phys. Plasmas. 2004. Vol. 11, No. 2. P. 339-491.
- Basov N. G., Gus'kov S. Yu., Feoktistov L. P. Thermonuclear gain of ICF targets with direct heating of ignitor // J. Sov. Laser Research. 1992. Vol. 13, No. 5. P. 396-399.
- Tabak M., Hammer J., Glinsky M. E. et al. Ignition and high gain with ultrapowerful lasers // Phys. Plasmas. 1994. Vol. 1, No. 5. P. 1626-1634.
- Roth M., Cowan T. E., Key M. H. et al. Fast ignition by intense laser-accelerated proton beams // Phys. Rev. Let. 2001. Vol. 86, No. 3. P. 436-439.
- 5. Гусъков С. И. Прямое зажигание мишеней инерциального термоядерного синтеза потоком ионов лазерной плазмы // Квантовая электроника. 2001. Т. 31, № 10. С. 885—890.
- 6. Caruso A., Strangio C. Ignition thresholds for deuterium-tritium mixtures contaminated by high-z material in cone-focused fast ignition // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. Вып. 5. С. 1058—1067.
- 7. *Чуразов М. Д., Аксенов А. Г., Забродина Е. А.* Воспламенение термоядерных мишеней пучком тяжелых ионов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 1. С. 20–28.

- 8. Medin S. A., Churazov M. D., Koshkarev D. G. et al. Evaluation of a power plant concept for fast ignition heavy ion fusion // Laser and Particle Beams. 2002. Vol. 20, No. 3. P. 419-422.
- 9. Пашинин П. П., Прохоров А. М. Получение высокоплотной дейтериевой плазмы при лазерном нагреве специальной газовой мишени // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. Вып. 1. С. 189—194.
- Fortov V. E., Khishchenko K. V., Levashov P. R., Lomonosov I. V. Wide-range multi-phase equations of state for metals // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 1998. Vol. 415, No. 3. P. 604-608.
- 11. Афанасьев Ю. В., Гамалий Е. Г., Розанов В. Б. Основные уравнения динамики и кинетики лазерной плазмы // Труды ФИАН. 1982. Т. 134. С. 10—31.
- 12. Калиткин Н. Н., Костомаров Д. П. Математические модели физики плазмы (обзор) // Математическое моделирование. 2006. Т. 18, № 11. С. 67—94.
- 13. Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов. М.: Наука, 1971.
- Чарахчьян А. А., Грынь В. И., Хищенко К. В. О роли теплопроводности в формировании высокотемпературной плазмы при встречном ударе волн разгрузки твердого дейтерия // ПМТФ. 2011. Т. 54, № 4. С. 3—20.
- 15. Бракнер К., Джорна С. Управляемый лазерный синтез. М.: Атомиздат, 1977.
- 16. Гуськов С. Ю., Розанов В. Б. Кинетика термоядерных частиц в лазерной плазме // Труды ФИАН. 1982. Т. 134. С. 115—122.
- 17. Выговский О. Б., Ильин Д. А., Левковский А. А. и др. Торможение быстрых заряженных частиц в идеальной плазме с произвольной степенью вырождения: Препринт № 72. М.: ФИАН, 1990.
- 18. *Сивухин Д. В.* Кулоновские столкновения в полностью ионизованной плазме // Вопросы теории плазмы. 1964. Вып. 4. С. 81—187.
- 19. Баско М. М. Физические основы инерциального термоядерного синтеза. М.: МИФИ, 2009.
- 20. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
- 21. *Марчук Г. И., Имшенник В. С., Баско М. М.* Физика термоядерного взрыва шара из сжиженного дейтерия нормальной плотности // УФН. 2009. Т. 179, № 3. С. 289—295.
- 22. Зельдович Я. Б. Взаимодействие свободных электронов с электромагнитным излучением // Там же. 1975. Т. 115, № 2. С. 161—197.
- 23. Годунов С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Математический сборник. 1959. Т. 47(89), № 3. С. 271—306.
- 24. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1972.
- 25. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.

Статья поступила в редакцию 28.11.12.

УДК 519.6

# МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛИ СКЛОНОВОГО СТОКА ДОЖДЕВЫХ ОСАДКОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ВОДОСБОРА РЕЧНОЙ СЕТИ

# В. М. Конюхов, А. А. Савельев, М. Г. Храмченков, А. Н. Чекалин, Н. Е. Галиуллина (КФУ, г. Казань)

В рамках модели двумерной кинематической волны дается математическое описание склонового стока дождевых осадков на поверхности водосбора речной сети с учетом впитывания воды в зону неполного насыщения почвы. Для определения содержания влаги в этой зоне предложен приближенный подход, основанный на модели капиллярной пропитки. Показано, что в начальный момент появления жидких осадков склоновый сток не образуется. Запаздывающий аргумент и момент появления склонового стока вычисляются из системы алгебраических уравнений.

Разработаны численная и алгоритмическая модели, реализованные в программном комплексе, позволяющем проводить расчеты поверхностного стока. Проведено исследование склонового стока на данных по бассейну реки Меша Республики Татарстан.

*Ключевые слова:* численное моделирование, кинематическая волна, склоновый сток, поверхность водосбора, зона неполного насыщения, капиллярная пропитка.

#### Введение

Моделирование процессов, формирующих сток осадков на поверхности водосбора регионального масштаба, традиционно представляет значительный интерес для гидрологии, гидрогеологии, метеорологии и других смежных наук, включая геоэкологию. Сложность и многофакторность процессов, формирующих сток осадков в течение года, предполагает интенсивное применение математического моделирования [1—3].

Под склоновым стоком понимают движение воды по поверхности, имеющей уклон к речной сети, а также в толще почвогрунтов склона. Склоновый сток — это важнейший элемент процесса формирования речного стока, который определяется впитыванием и испарением воды, поступившей на водосбор, по всей его площади [4-6]. Он может быть представлен в виде трех составляющих: поверхностный сток (сплошной или ручейковый), подповерхностный и подземный, или грунтовый (для больших склонов). Термин подповерхностный сток близок по смыслу к часто используемому понятию внутрипочвенный сток, которое применяется при моделировании сравнительно быстрого движения воды в верхних слоях почвы вдоль склона (фильтрация воды и сквозной сток по макропорам и трещинам). При этом скорость движения воды вдоль склона под поверхностью водосбора, с одной стороны, заметно меньше, чем на его поверхности, а с другой стороны, превышает скорость движения грунтовых вод в водоносном горизонте. Грунтовый сток, т. е. движение воды к речной сети в насыщенных водоносных слоях, формирует слабо изменяющуюся составляющую гидрографа, хотя часть воды из насыщенных водоносных горизонтов может поступать в речное русло сразу после выпадения осадков. В различных физико-географических районах [7—9], даже в пределах сравнительно небольших водосборов, формирование склонового стока может определяться разнообразными механизмами. Часто различные виды склонового стока переходят друг в друга, изменяясь в зависимости от состояния поверхности, предшествующего увлажнения, интенсивности и общего количества осадков разного типа, выпавших на склоновую поверхность [10-17].

## Математическая модель

Для математического описания поверхностной и подповерхностной составляющих склонового стока воспользуемся концепцией двумерной кинематической волны [1, 8]. Содержание влаги в зоне неполного насыщения (ЗНН (почве)) предлагается определять на основе приближенного подхода в рамках модели капиллярной пропитки. В этом случае математическая модель склонового стока воды на поверхности водосбора может быть описана следующей системой уравнений, учитывающих пространственно-временные изменения толщины водного слоя на поверхности водосбора в зависимости от осадков и впитывания воды:

$$\frac{\partial \left(U + \Theta\right)}{\partial t} + V_x + V_y = \varepsilon_1; \tag{1}$$

$$V_x = -\frac{\partial}{\partial x} \left( U^{5/3} V_{1,x} \right); \quad V_y = -\frac{\partial}{\partial y} \left( U^{5/3} V_{1,y} \right); \tag{2}$$

$$V_{1,x} = \frac{Z'_x}{n\sqrt{\nabla Z}}; \quad V_{1,y} = \frac{Z'_y}{n\sqrt{\nabla Z}}; \quad \nabla Z = \sqrt{Z'_x{}^2 + Z'_y{}^2}; \quad Z = H + U;$$
(3)

$$Z'_{x} = \frac{\partial Z}{\partial x}; \quad Z'_{y} = \frac{\partial Z}{\partial y}; \quad \Theta = \sqrt{a^{2}t^{2} + bt} - at; \quad a = \frac{g\rho r^{2}}{4\mu}; \quad b = \frac{\sigma r}{2\mu}\cos\alpha.$$
(4)

Здесь U — толщина водного слоя на поверхности водосбора;  $\Theta$  — функция, отражающая содержание жидкой воды в 3 HH;  $\varepsilon_1$  — заданная функция осадков и испарения; n — коэффициент шероховатости Маннинга; H — отметка поверхности земли;  $\rho, g, r, \sigma, \alpha, \mu, t$  — плотность воды, ускорение свободного падения, средний радиус пор в ЗНН, поверхностное натяжение, краевой угол смачивания, вязкость воды и время соответственно.

Решение уравнения (1) рассматривается в области G с границей  $\Gamma = \Gamma_{\rm B} + \Gamma_{\rm p},$  где  $\Gamma_{\rm B}$  — линия водораздела, Гр — створ реки. Начальные и граничные условия имеют вид

$$U(x, y, 0) = 0;$$
  $V_n|_{\Gamma_n} = 0,$  (5)

где  $V_n|_{\Gamma_{\rm B}}$  — нормальная к границе составляющая потока.

~

### Особенности решения уравнения (1)

1. Так как на границе водораздела  $\Gamma_{\rm B}$  нет притока воды, то U становится больше нуля только за счет функции  $\varepsilon_1$ . В то же время вода впитывается в ЗНН, а функция  $\frac{\partial \Theta}{\partial t}$  определяет этот расход. Очевидно, при определенных условиях (недостаточное количество осадков) вода может полностью уйти в ЗНН, и тогда склонового стока не образуется, т. е. U = 0. Из уравнения (1) и третьего равенства (4) следует, что если в области G имеет место неравенство

$$\varepsilon_1 \le \frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{a^2 t + \frac{b}{2}}{\sqrt{a^2 t^2 + bt}} - a,\tag{6}$$

то U = 0 и все осадки успевают впитаться.

2. Рассмотрим уравнение (1) в начальный момент времени, т. е. при  $t \to 0$ . Поверхностный сток может возникнуть только тогда, когда появятся осадки, поэтому  $\varepsilon_1|_{t \to 0} = \varepsilon_1^0$  — известное конечное значение. С другой стороны, для ЗНН t = 0 — момент появления мгновенного источника воды на границе этой зоны, расход которого определяется величиной  $\frac{\partial \Theta}{\partial t}$ . При  $t \to 0$  будем иметь 001

$$\left. \frac{\partial \Theta}{\partial t} \right|_{t \to 0} \approx 0.5 \sqrt{\frac{b}{t}} \to \infty.$$

Таким образом, в начальный момент времени выполняется условие (6) и поверхностный сток образуется не сразу, а только через некоторое время.

3. Функция  $\Theta$  определяет влагосодержание в ЗНН, а  $\frac{\partial \Theta}{\partial t}$  характеризует, с одной стороны, количество жидкости, поступающей через ее границу (поверхность земли), с другой стороны — скорость продвижения фронта насыщения в этой зоне. Соотношение в (4) получено в предположении, что на границе ЗНН достаточно воды, чтобы обеспечить максимально возможную скорость впитывания жидкости. Если же количество осадков меньше, то они впитываются полностью и количество воды,

поступившей в ЗНН, определяется уже не соотношением в (4), а функцией  $\varepsilon_1$ :  $\Theta = \int_{0}^{t} \varepsilon_1 d\tau$ .

Очевидно, в результате снизится скорость продвижения фронта насыщения. Поэтому с момента  $t_0$ , когда интенсивность осадков превысит интенсивность впитывания и на поверхности земли появится слой воды, функция  $\frac{\partial \Theta}{\partial t}$ , определяющая расход воды в ненасыщенную зону, будет иметь запаздывающий аргумент  $\tau_3$ . Таким образом, возникает задача определения  $t_0$  и  $\tau_3$ .

Обозначим  $t_1 = t_0 - \tau_3$ . При  $t = t_0$  интенсивность осадков равна интенсивности впитывания:

$$\frac{a^2 t_1 + 0.5b}{\sqrt{a^2 t_1^2 + b t_1}} - a = \varepsilon_1 (t_0).$$
(7)

На этот же момент времени все выпавшие осадки впитались в ЗНН и определили влагосодержание этой зоны. Отсюда имеем

$$\sqrt{a^2 t_1^2 + b t_1} - a t_1 = A(t_0), \quad A(t_0) = \int_0^{t_0} \varepsilon_1 d\tau.$$
(8)

Уравнения (7) и (8) составляют систему нелинейных уравнений для определения значений  $t_0$  и  $t_1$ . После несложных преобразований получим

$$t_1 = \frac{b}{2a^2} \left( \frac{\varepsilon_1(t_0) + a}{\sqrt{\varepsilon_1^2(t_0) + 2a\varepsilon_1(t_0)}} - 1 \right); \tag{9}$$

$$A(t_0) = \frac{b}{2a} \left( 1 - \frac{\varepsilon_1(t_0)}{\sqrt{\varepsilon_1^2(t_0) + 2a\varepsilon_1(t_0)}} \right).$$
(10)

Из уравнения (10) вычисляется значение  $t_0$ , а из (9) —  $t_1$ . Если  $\varepsilon_1 = \text{const}$  при  $t < t_0$ , то  $A(t_0) = t_0 \varepsilon_1$  и поставленная задача легко решается:

$$t_0 = \frac{b}{2a\varepsilon_1} \left( 1 - \frac{\varepsilon_1}{\sqrt{\varepsilon_1^2 + 2a\varepsilon_1}} \right); \quad \tau_3 = t_0 - t_1 = \frac{b}{2a^2} \left( 1 + \frac{a}{\varepsilon_1} - \sqrt{1 + \frac{2a}{\varepsilon_1}} \right). \tag{11}$$

Таким образом, поверхностный сток образуется при  $t \ge t_0$ , а функция  $\Theta$  определяется из соотношения с запаздывающим аргументом:

$$\Theta = \sqrt{a^2 \left(t - \tau_3\right)^2 + b \left(t - \tau_3\right)} - a \left(t - \tau_3\right).$$
(12)

4. Интенсивность выпадения осадков со временем может уменьшиться до значения, при котором будут образовываться области, где вся поступающая вода впитывается. В результате в некоторый момент времени  $t_{\rm kp}$  появится область  $D_{\rm kp}$  с границей  $\Gamma_{\rm kp}$ , в которой U = 0 при  $t > t_{\rm kp}$ . Тогда внутри этой области влагосодержание ЗНН будет определяться из соотношения

$$\Theta(t) = \Theta(t_{\rm kp}) + \int_{t_{\rm kp}}^{t} \varepsilon_1 d\tau.$$
(13)

На той части границы  $\Gamma_{\rm kp}$ , где поток воды направлен из  $D_{\rm kp}$ , U = 0 и не имеет скачка. На остальной части границы U может иметь скачок, а расход воды в ненасыщенную зону вычисляется из равенства

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \varepsilon_1 + V_n^+, \tag{14}$$

где  $V_n^+$  — поток воды через  $\Gamma_{\rm kp}$ .

Область  $D_{\rm kp}$  может исчезнуть, если интенсивность осадков увеличится. В этом случае, как в п. 3, нужно будет вычислить запаздывающий аргумент  $\bar{\tau}_3$  и момент времени  $\bar{t}_0$ , когда интенсивность осадков превысит интенсивность впитывания и на поверхности земли появится слой воды. Для этого потребуется решить систему уравнений, аналогичную системе (7), (8), в которой видоизменяется только  $A(t_0)$ , а именно

$$A(\bar{t}_0) = \Theta_{\kappa p} + \int_{t_{\kappa p}}^{t_0} \left(\varepsilon_1 + V_n^+\right) d\tau.$$
(15)

Таким образом, задача может быть сформулирована следующим образом: найти решение  $U \ge 0$  и  $\Theta$  системы уравнений (1)—(4), (9)—(15) с начальными и граничными условиями (5) и вычислить поток воды через створ реки  $\Gamma_{\rm p}$ .

#### Численный метод и алгоритм решения поставленной задачи

Нелинейное дифференциальное уравнение, описывающее склоновый сток на поверхности водосбора, решается конечно-разностным методом. Для этого область D покроем сеткой  $D_h$  с шагами  $h_x$  и  $h_y$  по переменным x и y соответственно таким образом, чтобы границы элементарных ячеек лежали на границе  $\Gamma$ . Сеточную границу области  $D_h$  обозначим через  $\Gamma_h$ .

При склоновом поверхностном стоке обычно выполняется условие  $|\text{grad } Z| \neq 0$  и, как правило,  $|\text{grad } H| \gg |\text{grad } U|$ . Казалось бы, можно пренебречь производными  $U'_x$ ,  $U'_y$  и принять grad Z == grad H. Однако в определенных условиях  $U'_x$ ,  $U'_y$  могут оказать значительное влияние на поверхностный сток. Поэтому в уравнениях (3) примем grad Z = grad H, а производные  $Z'_x$ ,  $Z'_y$  в первых двух равенствах приближенно представим в виде  $Z'_x \approx \sqrt{H'_x + U'_x} \sqrt{H'_x}$ ;  $Z'_y \approx \sqrt{H'_y + U'_y} \sqrt{H'_y}$ . Учитывая характерные особенности рассматриваемой задачи, будем использовать линеаризированную неявную разностную схему. Для этого потоки через границы элементарных ячеек представим в виде

$$\widetilde{V}_{i\pm1/2,j} = \begin{cases}
U_{i\pm1/2,j}^{t+\tau} \left(U_{i\pm1/2,j}^{t}\right)^{2/3} V_{1,i\pm1/2,j}, & (x_{i\pm1/2}, y_{j}) \in D_{h}; \\
0, & (x_{i\pm1/2}, y_{j}) \in \Gamma_{h}; \\
\widetilde{V}_{i,j\pm1/2} = \begin{cases}
U_{i,j\pm1/2}^{t+\tau} \left(U_{i,j\pm1/2}^{t}\right)^{2/3} V_{1,i,j\pm1/2}, & (x_{i}, y_{j\pm1/2}) \in D_{h}; \\
0, & (x_{i}, y_{j\pm1/2}) \in \Gamma_{h}; \\
0, & (x_{i}, y_{j\pm1/2}) \in \Gamma_{h}; \\
\end{bmatrix}$$
(16)

$$V_{1,i\pm 1/2,j} = 2 \frac{h_y}{h_x} \frac{\text{sign} \left(Z_{i\pm 1,j} - Z_{i,j}\right) \sqrt{|Z_{i\pm 1,j} - Z_{i,j}|} \sqrt{|H_{i\pm 1,j} - H_{i,j}|}}{K_{i\pm 1/2,j} \left(n_{i,j} + n_{i+1,j}\right)};$$

$$V_{1,i,j\pm 1/2} = 2 \frac{h_y}{h_x} \frac{\text{sign} \left(Z_{i,j\pm 1} - Z_{i,j}\right) \sqrt{|Z_{i,j\pm 1} - Z_{i,j}|} \sqrt{|H_{i,j\pm 1} - H_{i,j}|}}{\left(n_{i,j} + n_{i,j+1}\right) K_{i,j\pm 1/2}};$$
(17)

$$K_{i\pm 1/2,j} = \begin{cases} \widetilde{K}_{i\pm 1/2,j}, & (H_{i\pm 1,j} - H_{i\pm 1,j+1}) (H_{i\pm 1,j} - H_{i\pm 1,j-1}) < 0; \\ \sqrt{\left|\frac{H_{i\pm 1,j} - H_{i,j}}{h_x}\right|}, & (H_{i\pm 1,j} - H_{i\pm 1,j+1}) (H_{i\pm 1,j} - H_{i\pm 1,j-1}) \ge 0; \end{cases}$$

$$\begin{split} K_{i,j\pm1/2} &= \begin{cases} \widetilde{K}_{i,j\pm1/2}, & (H_{i,j\pm1} - H_{i-1,j\pm1}) \left(H_{i,j\pm1} - H_{i+1,j\pm1}\right) < 0; \\ \sqrt{\left|\frac{H_{i,j\pm1} - H_{i,j}\right|}{h_y}\right|}, & (H_{i,j\pm1} - H_{i-1,j\pm1}) \left(H_{i,j\pm1} - H_{i+1,j\pm1}\right) \ge 0; \end{cases} \\ \widetilde{K}_{i\pm1/2,j} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \left[ \sqrt{\left(\frac{H_{i+1,j} - H_{i-1,j}}{2h_x}\right)^2 + \left(\frac{H_{i,j+1} - H_{i,j-1}}{2h_y}\right)^2} + \left(\frac{H_{i+1,j-1} - H_{i+1,j-1}}{2h_y}\right)^2 \right] \right\}^{-1/2}; \\ &+ \sqrt{\left(\frac{H_{i,j\pm1/2} - H_{i,j-1}}{2h_y}\right)^2 + \left(\frac{H_{i+1,j} - H_{i-1,j}}{2h_x}\right)^2} + \left(\frac{H_{i+1,j-1} - H_{i-1,j}}{2h_x}\right)^2}{2h_x} \right]} \\ \widetilde{K}_{i,j\pm1/2} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \left[ \sqrt{\left(\frac{H_{i,j+1} - H_{i,j-1}}{2h_y}\right)^2 + \left(\frac{H_{i+1,j-1} - H_{i-1,j}}{2h_x}\right)^2} + \left(\frac{H_{i,j\pm1-1} - H_{i,j\pm1-1}}{2h_x}\right)^2 + \left(\frac{H_{i+1,j+1} - H_{i-1,j\pm1}}{2h_x}\right)^2}{2h_x} \right] \\ &+ \sqrt{\left(\frac{H_{i,j\pm1+1} - H_{i,j\pm1-1}}{2h_y}\right)^2 + \left(\frac{H_{i+1,j\pm1} - H_{i-1,j\pm1}}{2h_x}\right)^2}} \right] \\ \end{cases}$$

где  $\tau$  — временной шаг.

Следует учесть, что реальные данные профиля поверхности склона могут быть такими, что  $H_{i,j} < H_{i\pm 1,j}$  и  $H_{i,j} < H_{i,j\pm 1}$ , а значит, градиент изменения склона направлен по диагонали элементарной ячейки, а склоновый поток — из ячейки  $D_{i,j}$  в одну или даже две ячейки, расположенные по диагонали. В этом случае наряду с потоками  $\widetilde{V}_{i\pm 1/2,j}$  и  $\widetilde{V}_{i,j\pm 1/2}$  необходимо вычислить потоки  $\widetilde{W}_{i\pm 1/2,j}$  из ячейки  $D_{i,j}$  в ячейки  $D_{i,j\pm 1}$  и  $\widetilde{W}_{i,j\pm 1/2}$  из ячейки  $D_{i,j\mp 1}$ . Для определения этих потоков вместо прямоугольных элементарных ячеек построим другие ячей-

Для определения этих потоков вместо прямоугольных элементарных ячеек построим другие ячейки. Пусть  $H_{i,j} > H_{i+1,j+1}$ . Если одновременно  $H_{i+1,j+1} < H_{i+1,j}$  и  $H_{i+1,j+1} < H_{i,j+1}$ , то очевидно, что основной поток направлен по диагонали из ячейки  $D_{i,j}$  в ячейку  $D_{i+1,j+1}$  и необходимо вычислить  $\widetilde{W}_{i+1/2,j}$ . Подчеркнем, что если хотя бы одно из этих трех условий не выполняется, то  $\widetilde{W}_{i+1/2,j} = 0$ .

На рис. 1 показаны преобразованные ячейки  $D_{i,j}$ ,  $D_{i+1,j}$ ,  $D_{i,j+1}$  и  $D_{i+1,j+1}$ . По построению граница  $M_1M_2$  ортогональна к отрезкам  $C_1D_1$  и  $C_2D_2$ , соединяющим середины соответствующих сто-



Рис. 1. Преобразование ячеек при направлении склонового потока по диагонали из ячейки  $D_{i,j}$  в ячейку  $D_{i+1,j+1}$ 

рон прямоугольных элементарных ячеек. Длина l отрезка  $M_1M_2$  определяется по формуле  $l = h_x h_y / \sqrt{h_x^2 + h_y^2}$ , а *диагональный* поток — из соотношений

$$\widetilde{W}_{i+1/2,j} = U_{i,j}^{t+\tau} \left( U_{i,j}^t \right)^{2/3} \omega_{i+1/2,j}, \quad \omega_{i+1/2,j} = -\frac{2l}{n_{i,j} + n_{i+1,j+1}} \frac{\sqrt{\left| \left( Z_{i+1,j+1} - Z_{i,j} \right) \right|}}{\left( h_x^2 + h_y^2 \right)^{1/4}}.$$
(18)

Определим потоки  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $v_3$  и  $v_4$  через границы  $A_1C_1M_1$ ,  $M_1D_1B_1$ ,  $A_2C_2M_2$  и  $M_2D_2B_2$ .

На участках границ  $A_1C_1$ ,  $D_1B_1$ ,  $A_2C_2$  и  $D_2B_2$  составляющие этих потоков вычисляются из соотношений (16), (17), но при этом их значения должны быть уменьшены в два раза из-за уменьшения длины границ. Рассмотрим оставшиеся участки  $C_1M_1$ ,  $M_1D_1$ ,  $C_2M_2$  и  $M_2D_2$ .

Если  $H_{i,j} \geq H_{i+1,j}$ , то поток направлен из ячейки  $D_{i,j}$  в ячейку  $D_{i+1,j+1}$  через ячейку  $D_{i+1,j}$  и можно принять, что граница  $C_1D_1$  лежит на линии тока и нормальная составляющая потока к этой границе равна нулю. Тогда потоки через границы  $A_1C_1M_1$  и  $M_1D_1B_1$  равны  $\widetilde{V}_{i\pm 1/2,j}/2$  и  $\widetilde{V}_{i,j\pm 1/2}/2$  соответственно.

Если  $H_{i,j} < H_{i+1,j}$ , то аппроксимация нормальной  $\theta_1$  и касательной  $\phi_1$  составляющих градиента поверхностного склона к границе  $C_1 D_1$  может быть представлена в виде

$$\theta_1 = \frac{\frac{h_y}{h_x} \left( H_{i+1,j} - H_{i,j} \right) + \frac{h_x}{h_y} \left( H_{i+1,j} - H_{i+1,j+1} \right)}{\sqrt{h_x^2 + h_y^2}}; \qquad \phi_1 = \frac{H_{i+1,j+1} - H_{i,j}}{\sqrt{h_x^2 + h_y^2}};$$

Аналогично при  $H_{i,j} < H_{i,j+1}$  запишем аппроксимацию нормальной  $\theta_2$  и касательной  $\phi_2$  составляющих градиента поверхностного склона к границе  $C_2 D_2$ :

$$\theta_2 = \frac{\frac{h_x}{h_y} \left( H_{i,j+1} - H_{i,j} \right) + \frac{h_y}{h_x} \left( H_{i,j+1} - H_{i+1,j+1} \right)}{\sqrt{h_x^2 + h_y^2}}; \qquad \phi_2 = \phi_1$$

Так как длины  $l_{C_1M_1}$ ,  $l_{M_1D_1}$  отрезков  $C_1M_1$ ,  $M_1D_1$  равны  $l_{C_1M_1} = l_{C_2M_2} = 0.5h_x^2 / \sqrt{h_x^2 + h_y^2}$  и  $l_{M_1D_1} = l_{M_2D_2} = 0.5h_y^2 / \sqrt{h_x^2 + h_y^2}$ , то потоки  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $v_3$  и  $v_4$  через границы  $A_1C_1M_1$ ,  $M_1D_1B_1$ ,  $A_2C_2M_2$  и  $M_2D_2B_2$  определяются соотношениями

$$\begin{aligned} v_{1} &= U_{i+1,j}^{t+\tau} \left( U_{i+1,j}^{t} \right)^{2/3} \left[ 0.5 V_{1,i+1/2,j} + l_{C_{1}M_{1}} \left( \theta_{1}^{2} + \phi_{1}^{2} \right)^{-1/4} \right]; \\ v_{2} &= U_{i+1,j}^{t+\tau} \left( U_{i+1,j}^{t} \right)^{2/3} \left[ 0.5 V_{1,i+1,j+1/2} + l_{M_{1}D_{1}} \left( \theta_{1}^{2} + \phi_{1}^{2} \right)^{-1/4} \right]; \\ v_{3} &= U_{i,j+1}^{t+\tau} \left( U_{i,j+1}^{t} \right)^{2/3} \left[ 0.5 V_{1,i,j+1/2} + l_{C_{2}M_{2}} \left( \theta_{2}^{2} + \phi_{2}^{2} \right)^{-1/4} \right]; \\ v_{4} &= U_{i,j+1}^{t+\tau} \left( U_{i,j+1}^{t} \right)^{2/3} \left[ 0.5 V_{1,i+1/2,j+1} + l_{M_{2}D_{2}} \left( \theta_{2}^{2} + \phi_{2}^{2} \right)^{-1/4} \right]. \end{aligned}$$

Таким образом, вместо соотношений (16) будем иметь

$$\begin{split} \widetilde{V}_{i+1/2,j} &= \begin{cases} v_1, & (x_{i+1/2}, y_j) \in D_h; \\ 0, & (x_{i+1/2}, y_j) \in \Gamma_h; \end{cases} \quad \widetilde{V}_{i+1,j+1/2} = \begin{cases} v_2, & (x_{i+1}, y_{j+1/2}) \in D_h; \\ 0, & (x_{i+1}, y_{j+1/2}) \in \Gamma_h; \end{cases} \\ \widetilde{V}_{i,j+1/2} &= \begin{cases} v_3, & (x_i, y_{j+1/2}) \in D_h; \\ 0, & (x_i, y_{j+1/2}) \in \Gamma_h; \end{cases} \quad \widetilde{V}_{i+1/2,j+1} = \begin{cases} v_3, & (x_{i+1/2}, y_{j+1}) \in D_h; \\ 0, & (x_{i+1/2}, y_{j+1}) \in \Gamma_h. \end{cases} \end{split}$$

Очевидно, что площади четырех преобразованных ячеек изменились, а именно  $S_{i,j} = S_{i+1,j+1} = = \frac{9}{8} h_x h_y$ ;  $S_{i+1,j} = S_{i,j+1} = \frac{7}{8} h_x h_y$ . Заметим, что если в ячейке  $D_{i,j}$  все диагональные потоки равны нулю, то она не преобразовывается и ее площадь  $S_{i,j} = h_x h_y$ .

Подобным образом определяются и другие диагональные потоки  $\widetilde{W}_{i-1/2,j}$  и  $\widetilde{W}_{i,j\pm 1/2}.$ 

Следует отметить, что, учитывая большую погрешность входных данных, можно использовать более простую аппроксимацию, приняв потоки через эти границы равными потокам через границы непреобразованных ячеек, т. е. вычислять их по формулам (16).

Как известно, при численном решении уравнений переноса для конвективных членов следует использовать аппроксимацию *против потока*, предписывающую брать значения искомой функции в ячейке, из которой вытекает рассматриваемый поток:

$$U_{i+1/2,j}^{t+\tau} \left( U_{i+1/2,j}^{t} \right)^{2/3} = \begin{cases} U_{i,j}^{t+\tau} \left( U_{i,j}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i+1/2,j} \leq 0; \\ U_{i+1,j}^{t+\tau} \left( U_{i+1,j}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i+1/2,j} > 0; \end{cases}$$

$$U_{i-1/2,j}^{t+\tau} \left( U_{i-1/2,j}^{t} \right)^{2/3} = \begin{cases} U_{i-1,j}^{t+\tau} \left( U_{i-1,j}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i-1/2,j} \geq 0; \\ U_{i,j}^{t+\tau} \left( U_{i,j}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i-1/2,j} < 0; \end{cases}$$

$$U_{i,j+1/2}^{t+\tau} \left( U_{i,j+1/2}^{t} \right)^{2/3} = \begin{cases} U_{i,j}^{t+\tau} \left( U_{i,j}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i-1/2,j} < 0; \\ U_{i,j}^{t+\tau} \left( U_{i,j}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i,j+1/2} \leq 0; \\ U_{i,j+1}^{t+\tau} \left( U_{i,j+1/2}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i,j+1/2} > 0; \end{cases}$$
(19)

$$U_{i,j-1/2}^{t+\tau} \left( U_{i,j-1/2}^{t} \right)^{2/3} = \begin{cases} U_{i,j-1}^{t+\tau} \left( U_{i,j-1}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i,j-1/2} < 0; \\ U_{i,j}^{t+\tau} \left( U_{i,j}^{t} \right)^{2/3}, & V_{1,i,j-1/2} < 0; \end{cases}$$

Запишем в области  $D_h$  консервативные разностные уравнения, аппроксимирующие уравнения (1), (2):

$$\tau \Lambda \left[ \widetilde{V} + \widetilde{W} \right]_{i,j} = S_{i,j} \left( U_{i,j}^{t+\tau} - U_{i,j} + \Theta_{i,j}^{t+\tau} - \Theta_{i,j} - \tau \varepsilon_{1,i,j} \right), \quad \varepsilon_{1,i,j} = \frac{1}{\tau} \int_{t}^{t+\tau} \varepsilon_1 d\tau;$$

$$\Lambda \left[ \widetilde{V} + \widetilde{W} \right]_{i,j} = \left( \widetilde{V} + \widetilde{W} \right)_{i+1/2,j} + \left( \widetilde{V} + \widetilde{W} \right)_{i,j+1/2} + \left( \widetilde{V} + \widetilde{W} \right)_{i,j-1/2}.$$

$$(20)$$

Как было показано выше, в начальный момент времени поверхностный слой воды не образуется, так как осадки полностью впитываются в ЗНН. Поэтому необходимо определить время запаздывания возникновения поверхностного стока воды. Для этого в каждой ячейке нужно решить уравнения (9), (10). Следует заметить, что интенсивность  $\varepsilon_1$  осадков и испарения воды, как правило, известна как средняя по площади и времени приближенная величина. Следовательно, время запаздывания  $t_0$  и запаздывающий аргумент  $\tau_3$  могут быть определены из равенств (11).

Если параметры a, b и  $\varepsilon_1$ , которые входят в соотношения (11), зависят от координат x, y, то значения  $t_0$  и  $\tau_3$  будут зависеть от сеточного узла  $(x_i, y_j)$ . В этом случае определяется минимальное значение  $t_0$ , которое принимается за начальный момент расчетов. Для ячеек, у которых время запаздывания больше  $t_0 + \tau$ , нужно сделать пересчет этого времени с учетом возможного притока из соседних ячеек. Действительно, при использовании явной схемы на первом временном слое при нулевых начальных условиях потоки через границы сеточных ячеек отсутствуют и приток воды происходит только за счет осадков  $\varepsilon_1$ . Но уже на следующем временном слое эти потоки возникают из ячеек, в которых  $t_0 < \bar{t}_0 + \tau$ .

Пусть, например, в элементарной ячейке  $D_{i,j}$   $t_0 > \bar{t}_0 + \tau$  и в нее поступает вода из ячеек  $D_{i-1,j}$  и  $D_{i,j-1}$ . Тогда при  $t > \bar{t}_0 + \tau$  количество воды A(t), поступившей в ячейку за время t, определяется

из равенства

$$A(t) = (t - \bar{t}_0 - \tau) B + \int_0^t \varepsilon_1 d\tau, \quad B = -\frac{\widetilde{V}_{i+1/2,j} + \widetilde{V}_{i,j-1/2}}{h_x h_y},$$
(21)

а расход воды S в ненасыщенную зону — суммой  $S = \varepsilon_1 + B$ . Таким образом, новые значения  $t_0$  и  $\tau_3$  определяются из той же системы уравнений (7), (8), но с другими правыми частями.

Выпишем решение системы для случая, когда  $\varepsilon_1$  не зависит от времени:

$$t_{0} = \frac{b}{2aS} \left( 1 - \frac{S}{\sqrt{S^{2} + 2aS}} \right) + \frac{B}{S} \left( \bar{t}_{0} + \tau \right); \quad \tau_{3} = \frac{b}{2a^{2}} \left( 1 + \frac{a}{S} - \sqrt{1 + \frac{2a}{S}} \right) + \frac{B}{S} \left( \bar{t}_{0} + \tau \right).$$
(22)

Если для вычисленного значения  $t_0$  оказывается, что  $t_0 < \bar{t}_0 + 2\tau$ , то для этой ячейки время запаздывания и запаздывающий аргумент становятся определенными и толщина слоя воды  $U_{i,j}^{t+\tau}$  определяется из сеточного уравнения (20) при шаге по времени, равном  $\bar{t}_0 + 2\tau - t_0$ . Если же  $t_0 > \bar{t}_0 + 2\tau$ , то процедура определения времени запаздывания и запаздывающего аргумента повторяется аналогичным образом на следующем шаге. Подобным образом решается задача и в том случае, когда образуются области, в которых временно исчезает водяной слой на поверхности земли, т. е. вся поступающая вода впитывается.

Обозначим через  $w^+$ сумму всех втекающих в ячейку потоков, а через  $\Theta_{i,j}^{t+\tau}$  — количество воды в ЗНН, вычисленное по формуле (12). Тогда условие

$$w^{+} + \frac{h_{x}h_{y}}{\tau} \left( U_{i,j} - \Theta_{i,j}^{t+\tau} + \Theta_{i,j} + \tau \varepsilon_{1,i,j} \right) < 0$$

$$\tag{23}$$

означает, что вся поступающая вода впитывается и  $U_{i,j}^{t+\tau} = 0$ . Следовательно,  $\Theta_{i,j}^{t+\tau}$  должно вычисляться не по формуле (12), а из соотношения

$$\Theta_{i,j}^{t+\tau} = U_{i,j} + \Theta_{i,j} + \tau \varepsilon_{1,i,j} + \frac{w^+ \tau}{h_x h_y}.$$
(24)

Разностная схема (16)-(24) является линеаризованной неявной схемой, представляющей собой систему линейных алгебраических уравнений. Для приведения этой системы к диагональному виду пронумеруем сеточные ячейки по убыванию высоты H. Это позволит решать уравнения последовательно, начиная с первого номера, соответствующего максимальной высоте рельефа поверхности.

Общая схема алгоритма заключается в следующем. Пусть на временном слое t на сетке  $D_h$  вычислены значения  $U_{i,j}^t$  и  $\Theta_{i,j}^t$ . По этим значениям из соотношений (17), (18) определяются потоки  $V_{i\pm1/2,j}, V_{i,j\pm1/2}$  и  $\omega_{i\pm1/2,j}, \omega_{i,j\pm1/2}$  на границах сеточных ячеек, в том числе потоки воды через створ реки  $\Gamma_p$ . Затем, начиная с первой ячейки, вычисляется количество  $\Theta_{i,j}^{t+\tau}$  воды в ЗНН, толщина  $U_{i,j}^{t+\tau}$  водного слоя на поверхности водосбора и потоки, вытекающие из ячейки. Если  $U_{i,j}^{t+\tau} = 0$ , то дополнительно рассчитывается время запаздывания  $t_0$  и запаздывающий аргумент  $\tau_3$ . Для определения количества воды, вытекшей из створа реки, производится суммирование по времени соответствующих значений потоков в полуузлах, лежащих на створе. Расчеты на временном слое  $t + \tau$  заканчиваются вычислением балансовых соотношений, подготовкой к переходу на следующий временной слой и проверкой признака окончания расчетов.

Разработанные алгоритмы реализованы в программе, предназначенной для расчетов склонового стока наряду с одновременной визуализацией их результатов.

### Верификация модели на данных по бассейну реки Меша Республики Татарстан

Для решения задачи задается граница расчетной области D, проходящая по водоразделу выбранного участка бассейна реки, и информация о рельефе склоновой поверхности с учетом глубины речной сети. Подготовка входных данных выполняется с использованием стандартных инструментальных геоинформационных систем, например, с помощью коммерческой программы ArcGIS или свободно распространяемых программных систем QGIS, GRASS, SAGA-GIS, TAS, WhiteBox с аналогичными функциональными возможностями.

В рассматриваемом примере в качестве исходной цифровой модели рельефа использовалась модель рельефа Земли, полученная как результат миссии Space Shuttle—SRTM (http://www2.jpl.nasa. gov/srtm/). С целью устранения артефактов модели (фиктивных бессточных областей) осуществлялась соответствующая коррекция рельефа. При построении модели гидросети использовались координаты x, y (в км) русла реки Меша и ее притоков с указанием их глубины (в мм). На рис. 2 (см. также цветную вкладку) приведен рельеф поверхности участка бассейна реки Меша с выделением границы водосбора и речной сети (расчетная область D).

Обозначим индексами "с" и "р" фильтрационные парамеры задачи для склоновой поверхности и речной сети соответственно. В базовом варианте расчетов при  $h_x = h_y = 400$  м сетка  $D_h$  содержит 21252 узла; значения коэффициентов шероховатости Маннинга, среднего радиуса пор ЗНН, поверхностного натяжения, краевого угла смачивания составляют  $n_c = 1,7 \text{ с/м}^{1/3}$ ;  $n_p = 0,03 \text{ с/м}^{1/3}$ ;  $r_c = r_p = 50$  мкм;  $\sigma_c = \sigma_p = 0,02$  H/м;  $\alpha_c = \alpha_p = 30^{\circ}$ ; продолжительность  $t_d$  осадков и их интенсивность  $\varepsilon_1$  равны соответственно 5 сут и 10 мм/сут; продолжительность расчетов  $t_{\kappa} = 10$  сут.

Значения временного шага  $\tau$  задавались таким образом, чтобы обеспечить сходимость и устойчивость разностного решения задачи. Так, в базовом варианте отличие результатов расчетов при  $\tau = 0.1$  ч и  $\tau = 0.01$  ч составляет менее 0.1%.

Специальная серия вычислительных экспериментов была выполнена при  $h_x = h_y = 100$  м. В этом случае сетка  $D_h$  содержит около 340000 узлов. Как показал анализ результатов расчетов, на более плотной сетке количество жидкости, впитавшейся в ЗНН, уровень стока на склоновой поверхности и количество воды, попавшей в речную сеть, по сравнению с базовым вариантом изменяются несущественно, в то время как в речной сети уровень воды становится значительно выше. Это связано с тем, что в рассматриваемой модели русло реки представляет собой последовательную однорядную



Рис. 2. Рельеф поверхности участка бассейна реки Меша с выделением границы водосбора и речной сети

цепочку ячеек. Поэтому уменьшение площади ячеек сетки приводит к росту толщины стокового водного слоя в русловой сети. При этом количество воды, проходящей через створ реки при расчетах на сетке  $100 \times 100$  м, отличается менее чем на 1,2 % от базового варианта. Этот интегральный показатель поверхностного стока является наиболее важным при оценке последствий, обусловленных паводком в речной сети. Неизменность характеристик водяного стока на склоновой поверхности и его интегральных показателей позволяет оценить влияние различных параметров на более грубой сетке  $400 \times 400$  м.

В первом (базовом) варианте дождевые осадки успевают полностью впитываться в почву до момента  $t_0 = 3,5$  сут. Формирование поверхностного водного слоя начинается лишь при  $t > t_0$ . Изменение толщины U(x, y) водного слоя (в мм) внутри расчетной области на моменты прекращения выпадения дождевых осадков и завершения расчетов показано на рис. 3,  $a, \delta$  (см. также цветную вкладку). Визуализация двумерных полей выполнена в виде тонированных карт, цветовая палитра которых и соответствующие ей диапазоны величин U(x, y) показаны в верхних частях рисунков. Хорошо видно, что при  $t = t_{\rm д}$  водный слой покрывает всю расчетную область. При этом наибольший подъем уровня воды наблюдается вдоль русла Меши и ее притоков. После прекращения осадков происходит постепенное уменьшение значений U на склоновой поверхности наряду с продолжающимся ростом (см. рис. 3,  $\delta$ ) уровня воды как в руслах рек, так и во временных стоках и оврагах. Один из таких временных стоков образуется вдоль левой границы расчетной области (см. рис. 2 и рис. 3, a).

Динамика изменения толщины  $U_c$  слоя воды в створе реки (точнее, средней толщины слоя воды в ячейке, содержащей створ) в зависимости от времени представлена на рис. 4 (кривая 1). Видно, что на начальном этапе происходит плавный рост  $U_c$  за счет поступления воды со склоновой поверхности в окрестности створа реки. Затем начинается резкий рост  $U_c$  с последующей стабилизацией за счет добегания воды с более удаленных участков речной сети. При t > 7 сут интенсивность подъема уровня воды в створе реки значительно усиливается из-за подхода воды от места слияния (координаты  $x \approx 53$  км,  $y \approx 28,5$  км) реки Меши и ее крупного притока (см. рис. 3,  $\delta$ ). Максимальный подъем уровня воды  $U_{c,max} = 855$  мм достигается при  $t_* = 7,6$  сут, т. е. через 2,6 суток после прекращения осадков. В дальнейшем начинается постепенное уменьшение толщины водного слоя по всей поверхности области D.

Были проведены восемь вариантов расчетов для оценки влияния различных параметров модели на процесс поверхностного стока. В таблице приведены наборы значений тех параметров, которые в вариантах 2—8 отличаются от данных варианта 1.

Как показал анализ результатов расчетов, качественная картина поверхностного стока во всех вариантах не меняется, так что соответствующие распределения U(x, y) в области D аналогичны представленным на рис. 3. Поэтому в дальнейшем количественные отличия даются в сравнении с вариантом 1 и демонстрируются с помощью временной зависимости  $U_c(t)$  в створе реки, показанной на рис. 4. Номера кривых на этом рисунке соответствуют номерам вариантов расчета.

Уменьшение поверхностного натяжения  $\sigma_{\rm p}$  в речной сети в два раза (вариант 2) по сравнению с вариантом 1 приводит к снижению количества воды, впитывающейся в почву внутри ячеек, содержащих русло реки. Как следствие, значение  $t_0$  уменьшается до 1,75 сут,  $U_{\rm c,max}$  возрастает до 950 мм и достигается на 0,5 суток раньше ( $t_* = 7,1$  сут). Толщина водного слоя в речной сети значительно

Значения отличаюш	цихся парамет	ров для разных	к вариантов	расчета
-------------------	---------------	----------------	-------------	---------

Параметр	Вариант расчета								
	1	2	3	4	5	6	7	8	
$\sigma_{ m p},{ m H}/{ m M}$	0,02	0,01	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	
$r_{ m p},$ мкм	<b>50</b>	50	25	50	50	50	50	50	
$n_{ m c},{ m c}/{ m M}^{1/3}$	1,7	1,7	1,7	0,85	1,7	1,7	$0,\!85$	1,7	
$t_{\scriptscriptstyle \mathcal{I}}, \mathtt{сут}$	5	5	5	5	$^{2,5}$	5	5	$^{2,5}$	
$arepsilon_1, {f mm}/{f cyt}$	10	10	10	10	20	15	15	30	



Рис. 3. Уровень U(x, y, t) водного слоя в расчетной области  $D_h$ : a - t = 5 сут;  $\delta - t = 10$  сут

увеличивается, что приводит к более гладкому характеру зависимости  $U_{c}(t)$  в створе реки (кривая 2 на рис. 4).

Как известно, с уменьшением среднего радиуса пор увеличивается объем воды, поглощаемой ЗНН. Вариант 3 служит для оценки влияния параметров  $\sigma_{\rm p}$  и  $r_{\rm p}$  на интенсивность потока в русловой сети.



Рис. 4. Зависимость толщины  $U_{\rm c}$  слоя воды в створе реки Меша от времени t

Как показал анализ результатов расчетов, одновременное пропорциональное уменьшение этих параметров не меняет решения задачи ни качественно, ни количественно, что приводит к совпадению кривых 1 и 3 на рис. 4.

Коэффициент шероховатости Маннинга оказывает существенное влияние на скорость стекания воды по склоновой поверхности и на толщину водного слоя. Уменьшение значения  $n_c$  склоновой поверхности в два раза в варианте 4, как и следовало ожидать, не изменяет значения  $t_0$ , но приводит к более интенсивному поднятию уровня воды. При этом  $U_{c,max}$  возрастает на 17% и достигается при  $t_* = 7,2$  сут. Однако к моменту окончания расчетов значения  $U_c$  в вариантах 1—4 близки между собой.

Для оценки влияния интенсивности  $\varepsilon_1$  осадков при сохранении их общего количества служит вариант 5, в котором значение  $\varepsilon_1$  увеличено, а время  $t_d$  уменьшено в два раза. Такое изменение параметров приводит к двукратному сокращению времени  $t_0$ , которое становится равным 1,75 сут. При этом, как и в базовом варианте,  $U_{\rm c,max} = 860$  мм и достигается через те же 2,6 суток после прекращения дождей. Это объясняется тем, что время добегания воды с более удаленных участков речной сети не зависит от интенсивности осадков. Интересно отметить, что через 5 суток после прекращения осадков толщина слоя воды на створе  $U_{\rm c} \approx 600$  мм и практически одинакова во всех рассмотренных выше вариантах.

В варианте 6 рассматривается ситуация, когда интенсивность осадков  $\varepsilon_1$  в 1,5 раза больше, чем в базовом варианте. Это приводит к тому, что общее количество выпавших осадков увеличивается в полтора раза, а формирование водного слоя начинается при  $t_0 = 2,4$  сут. Интенсивность поднятия уровня воды высока по всей речной сети. На створе максимальное значение  $U_{c,max} = 1960$  мм в 2,3 раза больше, чем в базовом варианте, и достигается менее чем через сутки после прекращения осадков. Как видно из рис. 4, увеличение общего количества осадков приводит к более сглаженному характеру зависимости  $U_c$  от времени. На момент окончания расчетов уровень стоковой воды в створе реки примерно в 1,4 раза выше, чем в базовом варианте.

В варианте 7 по сравнению с предыдущим вариантом уменьшен в два раза коэффициент шероховатости  $n_c$  склоновой поверхности. Из сравнения кривых 6 и 7 (см. рис. 4) нетрудно видеть, что характер зависимости  $U_c$  от времени не меняется. Прирост значения  $U_{c,max}$  составляет около 10%, что на 7% меньше, чем для аналогичной пары вариантов 1 и 4. Таким образом, влияние шероховатости  $n_c$  склоновой поверхности на изменение  $U_{c,max}$  снижается по мере роста общего количества выпавших на нее осадков.

В последнем варианте 8 общее количество осадков равно 75 мм и остается таким же, как в варианте 6, а их продолжительность  $t_{\rm d}$  уменьшена в два раза. В этом случае водный слой появляется на склоновой поверхности при  $t_0 = 1,2$  сут и очень быстро увеличивается по всей речной сети. На створе максимальное значение  $U_{\rm c,max} = 2\,190$  мм, а характер зависимости  $U_{\rm c}(t)$  остается таким же, как в варианте 6. Однако в отличие от аналогичной пары вариантов 1 и 5, для которой не наблюдалось прироста значения  $U_{\rm c,max}$ , в варианте 8 оно увеличилось примерно на 10% по сравнению с вариантом 6. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что влияние изменения интенсивности осадков  $\varepsilon_1$  на максимальный уровень  $U_{\rm c,max}$  склоновой воды в створе реки увеличивается с ростом общего количества выпавших осадков.

## Выводы

В рамках модели двумерной кинематической волны дано математическое описание нестационарного изменения толщины водного слоя на склоновой поверхности бассейна реки с учетом дождевых осадков и впитывания воды в ЗНН почвы. Построены численная и алгоритмическая модели, реализованные в соответствующем программном комплексе, позволяющем проводить многовариантные вычислительные эксперименты.

Работа выполнена в рамках Государственного контракта (№ Н.4j.45.40.10.1134) с Казанским филиалом Учреждения Российской академии наук Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и включена в пакет программ НИМФА.

## Список литературы

- 1. Антонцев С. Н., Епихов Г. П., Кашеваров А. А. Системное математическое моделирование процессов водообмена. Н.: Наука, 1986.
- 2. Орлов В. Г., Сикан А. В. Основы инженерной гидрологии. Ростов н/Д: Феникс С.-Пб.: Северо-Запад, 2009.
- Ambroise B., Freer J., Beven K. J. Generalization of the topmodel concepts: topographic indices of hydrological similarity // Water Resources Research. 1996. Vol. 32. P. 2135-2145.
- Anderton S. P., White S. M., Alvera B. Micro-scale spatial variability and the timing of snow melt runoff in a high mountain catchment // J. Hydrology. 2002. Vol. 268. P. 158-176.
- Beven K. J. Infiltration into a class of vertically non-uniform soils // Hydrological Sciences Journal. 1984. Vol. 29. P. 425-434.
- Beven K. J., Kirkby M. J. A physically-based variable contributing area model for basin hydrology // Hydrological Sciences Bulletin. 1979. Vol. 24, No. 1. P. 43-69.
- Dunne T., Moore T. R., Taylor C. H. Recognition and prediction of runoff-producing zones in humid regions // Ibid. 1975. Vol 20. P. 305-327.
- 8. Eagleson P. S. Dynamic Hydrology. N.-Y.: McGraw-Hill, 1970.
- Hewlett J. D., Hibbert A. R. Factors affecting the response of small watersheds to precipitation in humid areas // Forest Hydrology / Ed. by W. E. Sopper and H. R. Lull. N.-Y.: Pergamon, 1967. P. 275-290.
- 10. Jost G., Weiler M., Gluns D.R., Alila Y. The influence of forest and topography on snow accumulation and melt at the watershed-scale // J. Hydrology. 2007. Vol. 347. P. 101-115.
- 11. Luce C. H., Tarboton D. G., Cooley K. R. The influence of the spatial distribution of snow on basin-averaged snowmelt // Hydrological Processes. 1998. Vol. 12. P. 1671-1683.

- 12. Pomeroy J. W., Gray D. M., Shook K. R. et. al. An evaluation of snow accumulation and ablation processes for land surface modelling // Ibid. P. 2339-2367.
- 13. Pomeroy J. W., Dion K. Winter radiation extinction and reflection in a boreal pine canopy: measurements and modelling // Hydrological Processes. 1996. Vol. 10 (12). P. 1591-1608.
- Pomeroy J. W., Granger R. J., Pietroniro A. et al. Hydrological Pathways in the Prince Albert Model Forest. National Human Research Institute Contribution Series CS-97004. Saskatoon: Saskatchewan, 1997.
- Pomeroy J. W., Gray D. M., Hedstrom N. R., Janowicz J. R. Prediction of seasonal snow accumulation in cold climate forests // Hydrological Processes. 2002. Vol. 16 (18). P. 3543-3558.
- 16. Talbot C. A., Ogden F. L., Or D. Comment on Layer averaged Richards equation with lateral flow by Praveen Kumar // Advances in Water Resources. 2004. Vol. 27. P. 1041-1042.
- Winkler R. D., Spittlehouse D. L., Golding D. L. Measured differences in snow accumulation and melt among clearcut, juvenile, and mature forests in southern British Columbia // Hydrological Processes. 2005. Vol. 19 (1). P. 51-62.

Статья поступила в редакцию 14.12.12.

УДК 519.6

# ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС S-MPI ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ РАЗРАБОТКИ, ОПТИМИЗАЦИИ И ВЫПОЛНЕНИЯ ВЫСОКОПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ

# Г. И. Воронов, В. Д. Трущин, В. В. Шумилин, Д. В. Ежов (ООО "Центр компетенций и обучения", г. Саров)

Описывается разрабатываемый в рамках контракта с Министерством образования и науки РФ отечественный программный комплекс S-MPI, включающий в себя библиотеку S-MPI и программные инструменты для анализа корректности и эффективности параллельных приложений. Приводится сравнение производительности S-MPI и двух других широко распространенных реализаций MPI-2 (Open MPI 1.5.4 и MVAPICH 1.2.7).

*Ключевые слова:* МРІ, параллельные вычисления, проверка корректности, инструментальные средства анализа.

## Введение

Для эффективного использования современных кластерных вычислительных систем необходимы эффективные, надежные и удобные в использовании программные комплексы, поддерживающие стандарт MPI-2 [1, 2] и обеспечивающие ускоренную разработку, оптимизацию и выполнение высокопараллельных приложений. При реализации таких программных комплексов приходится решать множество теоретических и практических проблем, наиболее важными из которых являются отказоустойчивость, масштабируемость, адаптация к современным коммуникационным средам и топологии кластеров, поддержка смешанных моделей программирования и т. п.

Указанные проблемы в том или ином виде решаются в различных коммерческих и свободно распространяемых реализациях стандарта MPI-2, наиболее известны из которых Intel MPI, IBM Platform MPI, MPICH2, MVAPICH2 [3] и Open MPI [4—6]. Однако разработка всех этих программных продуктов находится под контролем иностранных государств или ассоциаций промышленных групп. Кроме того, в настоящее время нет ни одной реализации, которая бы удовлетворяла всем предъявляемым требованиям и, в частности, обеспечивала поддержку разрабатываемого в России аппаратного и программного обеспечения кластерных систем. Поэтому задача разработки отечественного программного комплекса, поддерживающего стандарт MPI-2, является очень актуальной.

В данной статье представлены состав и функциональное назначение разрабатываемого программного комплекса S-MPI, а также первые результаты его применения в отечественных промышленных приложениях.

# Состав и назначение программного комплекса S-MPI

Разрабатываемый программный комплекс (ПК) S-MPI предназначен:

- для создания параллельных прикладных программ и обеспечения их выполнения на широком спектре высокопроизводительных вычислительных систем, включая облачные и *грид*-сети;
- обеспечения полнофункциональной среды ускоренной разработки, отладки и оптимизации параллельных приложений.

Указанную функциональность ПК обеспечивают следующие компоненты:

- библиотека MPI, получившая название S-MPI, которая позволяет создавать и выполнять параллельные программы, использующие для распараллеливания функции стандарта MPI-2;
- программный компонент настройки параметров библиотеки MPI, предназначенный для подбора оптимальных параметров библиотеки как для конкретного кластера, так и конкретного приложения;
- компонент проверки корректности, предназначенный для обнаружения реальных и потенциальных проблем, связанных с некорректным использованием функций MPI;
- компонент профилирования и трассировки приложения для сбора и сохранения информации о вызовах MPI-функций во всех процессах приложения;
- 5) компонент обработки данных с графическим интерфейсом для обеспечения визуализации профилировочной и трассировочной информации о выполнении параллельного приложения;
- 6) программа установки ПК MPI-2 на вычислительную систему.

Ядром ПК S-MPI является библиотека S-MPI. Все остальные компоненты ПК используются для отладки, анализа производительности и оптимизации параллельных приложений, собранных с библиотекой S-MPI.

## Библиотека S-MPI

Одной из главных особенностей библиотеки является универсальность — обеспечение независимости параллельных программ от архитектур многопроцессорных систем, на которых они выполняются. То есть однажды откомпилированное и собранное с библиотекой S-MPI приложение может выполняться на кластерных системах с различной архитектурой, в том числе гибридной (CPU, GPU, Intel Phi), и произвольной коммуникационной средой из числа поддерживаемых (таких как Ethernet и InfiniBand).

В качестве кодовой базы для разработки отечественной библиотеки S-MPI была выбрана наиболее распространенная и подходящая для этих целей реализация стандарта MPI-2 с открытым кодом Open MPI. К основным достоинствам библиотеки Open MPI можно отнести:

- наиболее приспособленную для расширений функциональности модульную архитектуру MCA (Modular Component Architecture);
- поддержку неоднородных коммуникационных сред;
- средства обеспечения надежности;
- широкий набор поддерживаемых возможностей;
- хорошую производительность и масштабируемость выполнения приложений.

Но, как и все коды открытого доступа, библиотека Open MPI имеет ряд недостатков, затрудняющих ее промышленное использование:

- отсутствие универсальности (т. е. зависимость выполнения приложения от программной и аппаратной среды кластера, на котором библиотеки и приложение были собраны);
- недостаточную стабильность;
- негарантированную бинарную совместимость между версиями;
- отсутствие средств для проверки корректности использования MPI в приложениях.

По сравнению с Open MPI библиотека S-MPI существенно усовершенствована в части универсальности использования, стабильности и надежности, а также дополнена новыми возможностями. Она, в частности, обеспечивает:

- универсальность выполнения прикладной программы на кластерах с произвольной коммуникационной средой;
- автоматический выбор наиболее эффективных коммуникационных сред из числа доступных;
- автоматическое определение и использование топологии кластерной системы для выбора оптимальных алгоритмов функционирования компонентов библиотеки;
- специальные топологические алгоритмы коллективных операций;
- новый механизм передачи сообщений через общую память;
- поддержку многопоточности MPI-процессов уровня MPI\_THREAD\_MULTIPLE вне зависимости от природы потоков (Posix, OpenMP, TBB);

- гибкое управление размещением процессов и их потоков на вычислительных ядрах;
- сбор внутренней статистики о вызовах MPIфункций приложением (интенсивность вызовов, использованное время, аргументы вызова и т. д.).

За счет перечисленных и других усовершенствований производительность библиотеки S-MPI существенно улучшена по сравнению с Open MPI. На рис. 1, 2 приведено интегральное сравнение производительности по всем тестам IMB (Intel® MPI Benchmarks) двух версий библиотеки Open MPI (1.5.4 и 1.6.3) с библиотекой S-MPI версии 0.1 для разных конфигураций запуска. Правильность применения методов усовершенствования S-MPI подтверждается интегральным ускорением до двух и более раз для разных длин сообщений.

Библиотека S-MPI была успешно испытана на тестовых моделях промышленных приложений ЛОГОС-прочность [7, 8] и ЛОГОС-СFD [8, 9], разрабатываемых в РФЯЦ-ВНИИЭФ. Следует отметить, что для этих запусков были использованы оптимальные параметры библиотеки S-MPI, подобранные вручную, исходя из особенностей указанных приложений. Как видно из рис. 3. 4, выполнеприложений ускорилось  $18\,\%$ ние до для ЛОГОС-CFD и до 30—40 % для ЛОГОСпрочность. Нет сомнения в том, что использованные оптимальные параметры для S-MPI могут быть определены компонентом автоматической настройки параметров MPI.

Помимо производительности, основными характеристиками библиотеки MPI являются масштабируемость и отказоустойчивость.



Рис. 1. Интегральное сравнение производительности библиотек MPI на тестах IMB для общей памяти (16 процессов на одном узле для процессора AMD Interlagos): светло-серые столбцы — Open MPI 1.5.4; серые — Open MPI 1.6.3; черные —S-MPI



Рис. 2. Интегральное сравнение производительности библиотек MPI с коммуникационной средой InfiniBand QDR (384 процессов на 32 узлах архитектуры Intel Westmere): светло-серые столбцы — Ореп MPI 1.5.4; серые — Ореп MPI 1.6.3; черные — S-MPI



Рис. 3. Сравнение производительности тестовой модели ЛОГОС-СFD (ЛОГОС-гидродинамика) с разными библиотеками MPI для разных конфигураций запуска: серый цвет — MVAPICH 1.2.7; черный — S-MPI 0.1



Рис. 4. Сравнение производительности тестовой модели ЛОГОС-прочность (ЛЭГАК-ДК) с разными библиотеками МРІ для разных конфигураций запуска: серый цвет — MVAPICH 1.2.7; черный — S-MPI 0.1

Решение проблемы масштабируемости изначально заложено в архитектуру Open MPI библиотека поддерживает до сотен тысяч одновременно работающих процессов. Библиотека S-MPI еще более усовершенствована в части масштабируемого запуска и уменьшения накладных расходов библиотеки в сверхбольших запусках.

Для обеспечения отказоустойчивости в библиотеке реализованы механизмы автоматического переключения на альтернативную коммуникационную среду в случае отказа основной, средства автоматического продолжения выполнения приложения в случае отказа одного из каналов передачи данных в многоканальной конфигурации коммуникационной среды, а также поддержка контрольных точек (checkpoint/restart).

# Инструменты анализа параллельных приложений

Создание эффективной параллельной программы требует значительно больше ресурсов (людских и временных), чем создание последовательной программы. Поэтому актуальны и востребованы инструментальные средства, помогающие отладить и оптимизировать параллельную программу.

Создание параллельной программы упрощается при наличии средств проверки правильности (корректности) использования функций MPIбиблиотеки. В ПК S-MPI разработан инструмент MCCT (MPI Correctness Checking Tool). Он содержит около ста проверок, выполняющих анализ параметров используемых MPIфункций, проверку целостности передаваемых данных между MPI-процессами, отслеживание возможных потерь двухточечных сообщений, проверку условий возникновения потенциальных и реальных взаимоблокировок (deadlocks) между MPI-процессами с учетом возможных условий гонки (race conditions) и множество других. Предусмотрена возможность отслеживания стека вызовов, которая позволяет более точно указать проблемное место в приложении.

Инструмент МССТ является динамически подгружаемым на этапе запуска МРІ-задачи, т. е. все проверки осуществляются в реальном времени на стадии исполнения (runtime). При этом он не оказывает чрезмерного влияния на производительность проверяемого МРІ-приложения по сравнению с программамиконкурентами, такими как Intel Message Checker, Marmot, MUST.

В процессе написания параллельных приложений на первый план, помимо отладки, выходят вопросы их эффективности (с точки зрения параллелизма). Решить эти вопросы с использованием стандартных средств анализа обычных приложений невозможно. Поэтому необходимы инструменты для анализа эффективности параллельных приложений и сбалансированности их процессов. Эти инструменты должны базироваться на сборе профилирующей (статистической) и трассировочной (реализующей зависимость от времени) информации и средствах ее последующего анализа.

Существует несколько пакетов, которые предназначены для анализа параллельных приложений; наиболее известны коммерческие продукты ITAC (Intel Trace Analyzer and Collector), Vampire, предоставляющие широкие возможности для анализа. Но они также имеют ряд недостатков, особенно в части масштабируемости при работе с сотнями и тысячами процессов. С увеличением размеров запусков параллельных приложений объемы собираемых и затем анализируемых трасс растут и, начиная с некоторого значения, становятся критически большими. Это могут быть трассы объемом в десятки и сотни гигабайтов, а в близком будущем уже и терабайтов, и даже десятки терабайтов. Трассы такого объема можно собирать, но очень трудно обрабатывать с использованием традиционных методов доступа к данным, так как время ожидания результата становится неприемлемо большим.

Вновь разработанный формат трассы XTF (eXtended Trace Format) решает эту проблему путем изменения способа организации данных в файле с возможностью получения времени доступа порядка  $O(\log(количество записей))$ , т. е. слабо зависящего от роста объема трассы. Основная идея состоит в использовании страничноструктурированного индексно-последовательного контейнера данных с возможностью прямого доступа к индивидуальной записи.

Использование XTF позволит ускорить процесс сбора трассы в несколько раз по сравнению с программами-конкурентами (ITAC, Vampire), но основной выигрыш ожидается при обработке трасс — процесс загрузки трассы ускорится в десятки и более раз из-за замены используемого конкурентами традиционного последовательного формата трасс. При этом сохраняется вся имевшаяся полнота функциональности. Программный компонент обработки данных с графическим интерфейсом предназначен для визуализации, обработки и анализа трасс параллельных приложений, собранных с помощью компонента профилирования и трассировки приложения. Компонент обеспечивает возможность поиска проблемных с точки зрения производительности мест в параллельных приложениях с целью повышения их эффективности и улучшения масштабируемости.

Графический визуализатор трасс использует кросс-платформенную библиотеку Qt [10], поэтому может функционировать под разными операционными системами (Linux, Windows). Компонент визуализации обеспечивает возможность автоматизированного графического анализа статистической и профилирующей информации с использованием:

- событийных шкал зависимости от времени для функций, коллективных и двухточечных операций;
- качественных и количественных отображений интенсивности обмена сообщениями между процессами;
- отображения информации от модуля проверки корректности;
- статистики по функциям, сообщениям, коллективным операциям;
- диаграмм сбалансированности процессов.

Предлагаемый инструмент сбора трасс выгодно отличается от конкурентных тем, что является отказоустойчивым к сбоям выполнения параллельной программы — информация о выполнении программы до момента сбоя будет сохранена и может быть проанализирована.

## Заключение

ПК S-MPI призван стать базой для обеспечения высокопараллельных расчетов в разных отраслях экономики. Библиотека S-MPI, удовлетворяющая современным требованиям и превосходящая зарубежные аналоги по основным характеристикам, позволит повысить эффективность использования отечественных компьютерных мощностей. Объединение в одном комплексе программных средств для разработки, исполнения, анализа и оптимизации параллельных приложений (сбор трасс, анализ эффективности, нахождение узких мест в производительности, проверка корректности кода и т. п.) позволит сократить сроки разработки и отладки параллельных приложений. И наконец, ПК S-MPI даст возможность адаптироваться к возможным отечественным компонентам аппаратного обеспечения и специфическим топологиям/конфигурациям отечественных кластеров (в том числе разрабатываемым в РФЯЦ-ВНИИЭФ).

В дальнейшем ПК S-MPI может стать базой для разработки программного обеспечения, позволяющего получить эксафлопсную производительность.

Работа по созданию ПК S-MPI ведется в рамках контракта (№ 07.524.12.4020) с Министерством образования и науки РФ.

## Список литературы

- Message Passing Interface Forum. MPI: A Message Passing Interface // Proc. "Supercomputing'93". Los Alamitos: IEEE Computer Society Press, 1993. P. 878-883.
- 2. Message Passing Interface Forum. MPI-2: Extensions to the Message-Pasing Iterface. http://www.mpi-forum.org/docs/mpi2report.pdf.
- 3. MVAPICH: MPI over InfiniBand, 10 GigE/ iWARP and RDMAoE. http://mvapich.CSE. ohio-stste.edu/.
- Gabriel E., Fagg G. E., Bosilca G. et al. Open MPI: Goals, concept, and design of a next generation MPI implementation // Proc. 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting. Budapest, Hungary. September 2004. P. 97– 104.
- Graham R. L., Woodall T. S., Squyres J. M. Open MPI: A flexible high performance MPI // 6th Int. Conf. on Parallel Processing and Applied Mathematics in Poznan. Poland, September 2005.
- Squyres J. M., Lumsdaine A. The component architecture of Open MPI: Enabling thirdparty collective algorithms // Proc. 18th ACM Int. Conf. on Supercomputing, Workshop on Component Models and Systems for Grid Applications / Ed. by V. Getov, T. Kielmann. France, St. Malo. July 2004. P. 167–185.
- 7. Циберев К. В., Артамонов М. В., Авдеев П А. и др. Параллельный пакет программ ЛЭГАК-ДК для расчета задач гидрогазодинамики и прочности на неструкту-

рированных сетках в лагранжево-эйлеровых переменных // Сб. тез. докл. XI межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. С. 111.

- Дерюгин Ю. Н., Козелков А. С., Спиридонов В. Ф. и др. Многофункциональный высокопараллельный пакет программ ЛОГОС для решения задач тепломассопереноса и прочности // Сб. тез. докл. Санкт-Петербургского науч. форума "Наука и общество". С.-Пб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2012.
- 9. Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К. и др. Многофункциональный

пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на многопроцессорных ЭВМ: базовые технологии и алгоритмы // Тр. XII Межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 11—15 октября 2010 г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 215—230.

10. Библиотека Qt. http://qt.digia.com (коммерческая версия); http://qt-project.org (свободно распространяемая версия).

Статья поступила в редакцию 20.02.13.

УДК 519.6

# РЕАЛИЗАЦИЯ СРЕДСТВ ПРИВЯЗКИ ПРОЦЕССОВ В БИБЛИОТЕКЕ МРІ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

А. В. Байдураев, С. И. Сапронов (ООО "Центр компетенций и обучения", г. Саров)

Описываются оригинальные программные средства, обеспечивающие закрепление за каждым процессом приложения определенного набора вычислительных ресурсов во время выполнения. Эти программные средства встраиваются в библиотеку MPI и позволяют эффективно влиять на производительность параллельных приложений.

Ключевые слова: MPI, параллельные вычисления, закрепление процессов.

## Введение

Внедрение перспективной концепции многоядерной архитектуры процессоров повлекло за собой быстрое развитие средств информационного и управляющего обеспечения этой концепции в реальном секторе применения — высокопроизводительных вычислительных кластерных Все значимые реализации MPI [1] системах. (Intel MPI [2], IBM Platform MPI [3], MPICH [4], Open MPI [5], и др.), предоставляющие программный сервис для кластерных систем, в той или иной степени обеспечивают пользователю средства доступа к инфраструктуре вычислительных систем с целью эффективного использования специфики многоядерных архитектур. Удобство применения этих средств во многом определяет привлекательность конкретной реализании MPI.

Средства привязки процессов в разрабатываемом программном комплексе S-MPI [6] предназначены для обеспечения закрепления за процессами и его потоками определенного набора вычислительных ресурсов во время выполнения приложения.

## Функционирование средств привязки

Описываемые программные средства достаточно автономны и могут быть интегрированы в конкретную реализацию MPI в качестве дополнительной библиотеки или встроены непосредственно в код без значительных трудозатрат. Основное требование к исполнительной среде реализации — это предоставление данных о распределении процессов приложения по узлам кластера на стадии запуска.

Средства привязки собирают необходимую информацию о требуемых приложением и имеющихся в наличии ресурсах, составе кластера и топологии каждого вычислительного узла, а также распределении MPI-процессов по узлам. При этом топологическая информация приводится к некоторому унифицированному виду с целью абстрагирования от специфики различных многоядерных архитектур. Во время выполнения приложения собранная информация предоставляется различным компонентам библиотеки MPI, которые могут использовать ее в целях повышения производительности приложения.

Закрепление процессов само по себе может способствовать более эффективному исполнению приложения ввиду отсутствия миграции процесса с ядра на ядро и связанных с этим накладных расходов или, например, возможности *разведения* процессов, конкурирующих за общие ресурсы.

# Пользовательский интерфейс средств привязки

Совокупность вычислительных ресурсов, выделяемых отдельному процессу, именуется доменом. Домен характеризуется числом счетных элементов (физических или логических ядер) и способом размещения этих элементов внутри узла. Вводится понятие *расстояния* между отдельными счетными элементами, основанное на количестве разделяемых этими элементами ресурсов (сокетов, кэшей, шин передачи данных). Чем больше общих ресурсов, тем расстояние между элементами меньше.

Пример распределения доменов для четырех ядер приведен на рис 1. В данном примере домен содержит два ядра с общим кэшем второго уровня, поэтому имеется возможность запустить в рамках процесса два потока, которые будут наиболее эффективно использовать общие вычислительные ресурсы.

Управление привязкой осуществляется пользователем посредством установки специальных переменных среды или задания опций в командной строке запуска приложения. Отдельной опции соответствует одна переменная среды. Опции командной строки имеют более высокий приоритет по сравнению с переменными среды.

Каждая опция или переменная среды предназначена для выполнения какой-либо функции закрепления: установки режимов работы, определения набора доменов, задания схем отображения множества процессов на множество процессоров.

Отображение множества процессов на домены может состоять из следующих шагов:

- 1) упорядочение заданного набора доменов;
- 2) циклический сдвиг на указанный шаг по доменам;
- дополнительный сдвиг на указанное количество доменов.

В случае, когда какой-либо шаг не указывается, выполняется действие по умолчанию.

Переменные среды или опции определяют:

- разрешающую способность привязки (физическое или логическое ядро);
- характеристики доменов;
- карту привязки процессов к доменам.

Библиотечные средства привязки транслируют ют требования пользователя во внутрисистемные вызовы, исполняя которые операционная система обеспечивает выполнение каждого процесса на строго определенном подмножестве ресурсов.

# Эффект привязки при обменах через разделяемую память

Передача MPI-сообщений через разделяемую память представляет собой копирование блоков данных из памяти одного MPI-процесса в память другого процесса посредством промежуточного буфера (очереди) в разделяемой памяти (рис. 2).

Один из основных методов оптимизации подобных передач состоит в том, чтобы при передачах сообщений учитывать топологию многоядерной архитектуры и, в частности, знать общие ресурсы, которые используют (*paзdeляют*) MPI-процессы. Например, необходимо знать, как будет осуществляться доступ к промежуточному буферу: будут ли данные буфера располагаться в процессорном кэше или передаваться только по шине данных. Для исключения накладных расходов на получение этой информации перед каждой



Рис. 1. Пример распределения доменов для четырех ядер



Рис. 2. Схема передачи сообщений через разделяемую память

передачей необходимо, чтобы при инициализации все MPI-процессы были закреплены на определенных процессорных ядрах, а информация о закреплении всех процессов на локальном узле была доступна каждому процессу на этом узле. При передаче данных между процессами, используя информацию о закреплении процессов и доступности общих ресурсов для каждой пары процессов, можно выбрать наиболее оптимальную процедуру копирования.

На рис. 3 приведен пример подобной оптимизации. За каждым MPI-процессом закреплено свое ядро, причем ядра попарно разделяют кэш второго уровня. Поэтому в случае передачи сообщений от процесса 0 к процессу 2 (когда процессы не разделяют общий кэш) выгодно, начиная с определенного порога размеров сообщений, копировать данные без использования кэша. То есть при копировании лучше использовать инструкции процессора, которые загружают данные непосредственно из памяти, минуя кэш (так называемые non-temporal-инструкции). В случае передачи сообщений от процесса 0 к процессу 1 (когда оба процесса разделяют кэш) даже большие сообщения размером до нескольких мегабайт выгодно копировать с использованием инструкций процессора, которые загружают сначала данные из кэша и только потом из памяти, если данных нет в кэше.

На рис. 4 приведен график для теста NetPIPE [7], демонстрирующий рост производительности при использовании оптимизации для случая, когда процессы не разделяют кэш. Заметим, что в данном случае оптимизация копирования используется для сообщений размером l > 16 кбайт.

#### Заключение

Исследования повышения производительности параллельных приложений за счет реализации средств привязки процессов в MPI были выполнены авторами на базе открытого кода Open MPI [5] в рамках контракта (№ 07.524.12.4020) с Министерством образования и науки РФ.

Дальнейшее развитие описанных средств предполагается осуществлять в направлении создания гибких унифицированных программных интерфейсов, допускающих несложную интеграцию в различные реализации MPI и осуществляющих информационный и управляющий сервис для всех вычислительных и коммуникационных ресурсов кластера.



Рис. 3. Схема копирования сообщений через разделяемую память с использованием информации о топологии многоядерной архитектуры



Рис. 4. Пропускная способность общей памяти для процессов, не разделяющих кэш:— — — без оптимизации; — — — с оптимизацией

## Список литературы

- Message Passing Interface Forum. MPI: A Message Passing Interface // Proc. of "Supercomputing'93". Los Alamitos: IEEE Computer Society Press, 1993. P. 878-883.
- 2. Intel MPI. http://software.intel.com/en-us/ intel-mpi-library.
- 3. IBM Platform MPI. http://www-03.ibm.com/ systems/technicalcomputing/ platformcomputing/products/mpi/index.html.
- 4. MPICH. http://www.mpich.org/.
- 5. Gabriel E., Fagg G. E., Bosilca G. et al. Open MPI: goals, concept, and design of a next generation MPI implementation //

Proc. 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting. Budapest, Hungary. September 2004. P. 97—104.

- Воронов Г. И., Трущин В. Д., Шумилин В. В., Ежов Д. В. Программный комплекс S-MPI для обеспечения разработки, оптимизации и выполнения высокопараллельных приложений на суперкомпьютерных кластерных системах // См. настоящий выпуск. С. 55–60.
- 7. NetPIPE. http://bitspjoule.org/netpipe.

Статья поступила в редакцию 07.12.12.

УДК 04981.211

# ОТЛАДЧИК ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ (PDB)

# В. К. Федоров, С. Н. Киселев (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Описываются возможности диалогового отладчика *параллельных* программ. Дается схема взаимодействия программных компонентов, которые составляют отладчик. Представлен пользовательский интерфейс.

Отладчик ориентирован на платформы Unix/Linux. Он обеспечивает отладку программ, написанных на языках программирования C, C++ и Fortran с использованием MPI- и OpenMP-стандартов.

*Ключевые слова:* многопроцессорная вычислительная система, отладчик, параллельное приложение.

## Введение

Стадия отладки является непременным этапом в жизненном цикле программных систем. Поэтому проблема отладки *параллельных* приложений на кластере или суперЭВМ всегда будет актуальной для разработчиков программного обеспечения. Решение этого вопроса — весьма сложная, нетривиальная задача.

Свободно распространяемые отладчики, как правило, не ориентированы на вычислительную систему с распределенной памятью. В их концепцию не входит управление множеством процессов, которые размещены по узлам кластера. Таковы отладчики, входящие в состав интегрированных систем разработки программного обеспечения или в операционную систему (ОС) Linux, например, GDB [1].

С другой стороны, существуют отладчики TotalView [2], DDT (Distributed Debugging Tool) [3], PGDBG Graphical Symbolic Debugger [4], которые по функциональности содержат все необходимые средства для отладки программ в вычислительной системе с распределенной памятью на базе OC Linux, однако являются коммерческими продуктами. Приобретаемая лицензия на использование отладчика накладывает ограничение на число одновременно отлаживаемых процессов для всех пользователей. Стоимость таких отладчиков пропорциональна максимальному числу процессов, указанных в лицензии. Приобретенный продукт ориентирован на определенную версию OC; при смене OC необходимо обновлять версию отладчика и приобретать новую лицензию.

Существует также расширение Intel® Parallel Debugger Extension [5] для Microsoft Visual Studio. Однако оно позволяет отлаживать программы только под OC Windows и только на одном компьютере.

По указанным причинам в РФЯЦ-ВНИИЭФ в 2009 г. был разработан новый графический отладчик параллельных приложений (PDB) [6], который достаточно эффективно обеспечивает решение возложенных на него задач.

В арсенале отладчика PDB есть все стандартные возможности:

- просмотр стека вызовов потока;
- управление точками останова и наблюдения;
- обзор, изменение переменных и ячеек памяти;
- контроль потоков.

В представляемом программном инструменте также реализованы средства отладки подмножества процессов. Наряду с этим осуществляется поддержка групповых точек останова.

Реализованная концепция отладки не требует каких-либо специальных изменений в программной библиотеке коммуникационной среды и пользовательских программах. PDB поддерживает системы пакетной обработки заданий JAM [7] и SLURM [8]. Отладчик создан на языке программирования Java. В нем используются базовые компоненты Eclipse-платформы [9, 10].

## Программные компоненты отладчика

Большинство современных средств отладки параллельных программ основано на представлении программы как совокупности выполняющихся процессов [2—4]. Исходя из этого построен и отладчик параллельных приложений PDB.

В состав отладчика PDB входят следующие компоненты:

- центральный программный компонент;
- программный агент;
- базовый отладчик, обеспечивающий отладку процесса.

Указанные компоненты и схема их взаимодействия изображены на рис. 1.

Данная конфигурация программных компонентов представляет собой распределенную архитектурную модель. Центральный программный компонент выполняется на инструментальном компьютере. Программный агент, базовый отладчик и процесс параллельной программы выполняются на вычислительных ресурсах, выделенных для отладки.

Центральный программный компонент. Основные средства, предназначенные для отладки параллельной программы, располагаются в центральном компоненте. Он представляет собой отдельное программное приложение. На рис. 2 показана логическая структура центрального компонента отладчика.

Его основными элементами являются модуль управления отладчиком и контроллер сессии отладки. Они обеспечивают управление элементами сессии отладки, такими как:

- выполнение операций с множеством процессов;
- контроль потоков каждого из процессов;
- работа с программными переменными;
- поддержка точек останова и наблюдения.

Взаимодействие с пользователем обеспечивается при помощи графического интерфейса. В оконном интерфейсе выводится состояние компонентов отладчика, соответствующее состоянию отлаживаемой программы. Также предоставляется набор функций для отладки параллельного приложения, доступных через различные меню.

Обмен данными между контроллером сессии отладки и программными агентами выполняет сетевой командный интерфейс.

**Программный агент.** Этот компонент является промежуточным звеном между центральным программным компонентом и базовым от-



Рис. 1. Компонентная схема отладчика



Рис. 2. Схема центрального компонента отладчика

ладчиком. Он выступает в качестве сервера и обслуживает поступающие к нему запросы. В процессе выполнения отлаживаемого процесса программный агент генерирует асинхронные сообщения. Эти сообщения могут представлять собой извещения об останове на контрольной точке, данные, выдаваемые отлаживаемым процессом на экран, диагностические сообщения базового отладчика и др. Обмен с базовым отладчиком осуществляется при помощи протокола МІ (Machine Interface) [1]. Это строчный протокол, посредством которого осуществляется машинноориентированный командный интерфейс с базовым отладчиком. Протокол предназначен специально для поддержки систем, которые используют отладчик как свой компонент.

Базовый отладчик. Данный компонент представляет собой системную программу для отладки процесса.

В качестве базового отладчика был выбран GDB. Он является свободно распространяемым, входит в состав всех дистрибутивов Linux, обладает необходимыми средствами для отладки процесса (запуск и останов процесса, работа с точками останова и точками наблюдения, просмотр и изменение значений переменных), предоставляет протокол MI для интеграции с внешними программами.

В качестве базового может выступать не только GDB, но и любой отладчик, совместимый с ним, например, входящий в состав компилятора Intel.

Принцип работы базового отладчика следующий. Он запускает отлаживаемый процесс, предоставляет агенту информацию о нем и выполняет команды отладки процесса, передаваемые ему от агента.

Процессу пользователя предоставляется виртуальный терминал для ввода/вывода информации. Терминальные данные процесса (запись/чтение стандартных потоков ввода/вывода) получает и передает программный агент.

## Архитектура и реализация отладчика

Применение в PDB стороннего базового отладчика не внесло ограничений в процесс разработки. В то же время это позволило сосредоточить ресурсы разработчиков на центральном компоненте отладчика, реализовать недостающие в GDB функции графической оболочки и возможность обобщенного управления процессами параллельного приложения.

Центральный программный компонент реализован как модульное приложение с поддержкой графического интерфейса. Взаимодействие модулей выполнено при помощи событийной модели и реестра сервисов. Такой подход позволяет не запутаться в обилии взаимодействующих частей и практически безгранично расширять центральный программный компонент. В основе центрального компонента лежит OSGi (Open Services Gateway Initiative) — спецификация динамической модульной шины для создания Java-приложений, разрабатываемая консорциумом OSGi Alliance [11]. Круг применений данной спецификации довольно широк: изначально она разрабатывалась для создания встроенных систем (в частности автомобилей BMW), но сейчас на базе OSGi строят многофункциональные desktop-приложения [9, 12].

В описываемой версии отладчика центральный компонент архитектурно разделен на десять модулей. Каждый модуль реализует определенный набор функций или содержит концептуальное описание реализации. Главные модули центрального компонента отладчика и их взаимодействие представлены на рис. 3. В эту схему не вошли утилитарные модули, например модуль поддержки конфигурации.

Ключевыми модулями являются модель отладчика и графический интерфейс.

Модель отладчика устанавливает правила согласованной работы модулей отладчика и определяет прототипы элементов этих модулей. Этот модуль описывает протоколы взаимодействия модулей, предоставляет интерфейсы элементов программы и реализует алгоритмы работы составных частей.

Модуль графического интерфейса осуществляет вывод на экран состояния объектов отладчика и обеспечивает взаимодействие с пользователем.

Модуль реализации отладчика содержит код, реализующий элементы отладки, такие как сессия отладки, точки останова и др.

Модуль сетевого командного интерфейса осуществляет обмен с программными агентами. Доступ к среде пересылки данных производится посредством Java-библиотеки NIO (New Input Output) [13]. Библиотека предназначена для реализации высокопроизводительного ввода/вывода в Java-приложениях. Для обработки соединений используется служба *select*, предоставляемая библиотекой, что дает возможность обрабатывать огромное количество данных, поступающих от множества соединений. Обмен реализован с использованием неблокирующих соединений. При этом для достижения максимальной пропускной способности библиотека использует службы уровня ОС, когда это возможно.

Взаимодействие между модулями отладчика обеспечивается при помощи внутренних команд и асинхронных сообщений. Асинхронные сообщения (события), с одной стороны, генерируются базовым отладчиком или отлаживаемым процессом. К таким событиям относятся срабатывание точки останова, вывод данных на печать отлаживаемым процессом и др. Полученное событие передается диспетчером в соответствующий модуль для выполнения требуемых операций. С другой стороны, действия пользователя также порождают события, которые запускают механизмы отладчика для их обработки.

В процессе отладки программы модули центрального компонента отладчика осуществляют манипуляции с отлаживаемыми процессами это изменение их состояния (пуск/стоп), чтение/изменение значений переменных и др. Для выполнения таких операций используется собственный программный интерфейс. Командами данного интерфейса являются Java-объекты, которые передаются по сети посредством ТСРпротокола. Для передачи команды по сети она предварительно преобразуется в поток байтов и заключается в конверт, заголовком которого является битовая строка. Номер разряда строки соответствует номеру процесса параллельной программы. Таким образом, установкой необходимых разрядов строки осуществляется обращение к определенному множеству отлаживаемых процессов.



Рис. 3. Архитектура центрального компонента отладчика: => — внутренние команды; — — асинхронные сообщения

# Описание работы параллельного отладчика

Центральный программный компонент реализован с использованием RCP-платформы [10]. Применяемая методика определяет наличие рабочего пространства — отдельного каталога, который автоматически создается в домашнем каталоге пользователя. Эта рабочая область служит для сохранения информации между сессиями отладки. Сохраняются следующие элементы сессии: состояние окон графического интерфейса, параметры, связанные непосредственно с сессией: точки останова, параметры задания и т. д. Это позволяет избежать некоторой рутины при повторном запуске отладчика после корректировки отлаживаемой программы, например, расстановки точек останова и задания групп процес-COB.

Рассмотрим взаимодействие модулей отладчика в целом, а также некоторые детали их работы.

Отладчик запускается пользователем. Центральный программный модуль стартует как обычное графическое приложение. Запуск параллельного приложения выполняется посредством систем пакетной обработки заданий JAM или SLURM [7, 8]. Центральный программный модуль отладчика взаимодействует с системой пакетной обработки, запуская соответствующие утилиты.

Далее пользователь в диалоговой форме вводит параметры задания. Для передачи параметров задания в систему пакетной обработки создается скрипт задания.

Процесс создания сессии отладки состоит из следующих шагов:

- на вычислительном поле системы пакетной обработки заданий стартует набор агентов, соответствующих процессам программы;
- 2) агент подключается к центральному модулю;
- 3) каждый агент запускает базовый отладчик;
- базовый отладчик порождает соответствующий процесс задания.

Центральный модуль ожидает подключения всех агентов. При подключении всех агентов начинается сеанс отладки параллельной программы.

Обмен данными между агентами и центральным модулем осуществляется по сетевому каналу при помощи протокола TCP. Обмен агента с базовым отладчиком производится посредством неименованных каналов с использованием машинного командно-строчного интерфейса MI.

Связь с каналами ввода/вывода процесса реализована с использованием виртуального терминала. Терминальный обмен с процессом осуществляет агент, транслирующий данные, передаваемые от виртуального терминала центральному модулю. Поступившие данные от каждого отлаживаемого процесса выводятся в соответствующем окне графического интерфейса, а также записываются в файл. Для хранения выводимых данных каждого процесса задания создается отдельный файл, размещаемый в рабочей области отладчика.

## Графическая оболочка отладчика

Управление отладкой параллельной программы осуществляется при помощи графического интерфейса. Пользователю предоставляется интерактивный контроль как над отдельным процессом, так и над их группой.

На рис. 4 (см. также цветную вкладку) представлен графический интерфейс отладчика. При создании сессии отладки, т. е. после старта задания на кластере, становятся активными графические компоненты интерфейса отладчика, которые помечены на рисунке указателями.

Указатель 1 обозначает окно управления группами процессов. Окно позволяет запускать и останавливать одновременно все процессы выбранной группы, а также манипулировать списками групп — создавать/удалять группы, добавлять/исключать процессы из группы. В этом окне отображается состояние процессов. Каждому состоянию процесса соответствует цвет пиктограммы: зеленый обозначает выполнение процесса, желтый — приостановку, красный — завершение процесса.

Окно, помеченное указателем 2, предназначено для управления отдельным процессом или потоком (запуска или приостановки его выполнения). В нем осуществляется навигация по потокам и фреймам стека процесса.

Локальные переменные выбранного фрейма стека (соответствующего функции отлаживаемой программы) выводятся в окне, отмеченном указателем 3. Окно предназначено для контроля и изменения значений переменных программы.

Точки останова выводятся в окне просмотра исходного текста, которое отмечено указателем 4. На левой вертикальной линейке окна



Рис. 4. Графический интерфейс отладчика

отображаются цветные пиктограммы, обозначающие типы точек останова. Устанавливаемая пользователем точка останова будет принадлежать только процессам выбранной группы. Такой подход позволяет гибко управлять точками останова в параллельном приложении.

Окна отладчика логически связаны. Переход от одного процесса к другому в окнах 1 или 2 вызывает автоматическое изменение отображаемой информации в остальных окнах.

### Заключение

Параллельный отладчик PBD прошел длительный этап тестирования, модернизации и использования на разных аппаратно-программных платформах. При его разработке учтен опыт эксплуатации таких программных продуктов, как GDB и отладчика, входящего в состав компилятора Intel. Отладчик PDB имеет следующие отличительные особенности, которые делают его достаточно удобным для пользователя:

- переносимость на разные платформы;
- графический интерфейс;
- быстрое время отклика (менее 2 секунд при отладке программы на 120 процессах);
- отладка нескольких процессов программы, запущенных на одном узле.

По функциональным возможностям PDB сопоставим с отладчиками TotalView [2] и DDT [3].

С 2009 г. отладчик PDB функционирует на неоднородном вычислительном комплексе РФЯЦ-ВНИИЭФ. Также PDB поставляется в составе базового программного обеспечения компактных суперЭВМ разработки ВНИИЭФ.

В настоящее время разрабатывается новая версия отладчика. Базовый отладчик подлежит исключению из программных компонентов PDB, его функции будет выполнять центральный компонент. Это позволит расширить функциональность отладчика, сократит трафик между центральным компонентом и программными агентами, что в целом улучшит качество обслуживания пользователей.

## Список литературы

- 1. Stallman R. M., Pesch R. H. Debugging with GDB. Free Software Foundation, 1992.
- 2. TotalView. http://www.totalviewtech.com.
- 3. The Distributed Debugging Tool. http://www.allinea.com.
- 4. PGDBG Graphical Symbolic Debugger. http://www.pgroup.com.
- 5. Intel® Parallel Debugger Extension. http://software.intel.com.
- Киселев А. Б., Киселев С. Н., Колпаков С. И., Федоров В. К. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010615637 Программа Отладчик

параллельных приложений (PDB) // Электронный бюллетень. 2010. № 4. С. 332. http://www.fips.ru.

- Киселев А. Б., Киселев С. Н. Система пакетной обработки заданий ЈАМ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 4. С. 60—66.
- 8. SLURM. http://www.llnl.gov/linux/slurm.
- 9. McAffer J., Vanderlei P., Archer S. Equinox and OSGi: The Power Behind Eclipse. Addison-Wesley Professional, 2009.
- 10. McAffer J., Lemieux J.-M. Eclipse Rich Client Platform. Addison-Wesley Professional, 2005.
- 11. OSGi Alliance. http://osgi.org.
- 12. Введение в OSGi. http://samolisov.blogspot. com/2009/03/osgi.html.
- 13. *Hitchens R.* Java NIO. O'Reilly, 2002. P. 91-145.

Статья поступила в редакцию 14.01.13.
# ПРОГРАММА EFRVIEWER ДЛЯ ЧИСЛОВОГО АНАЛИЗА НАЧАЛЬНЫХ И РАСЧЕТНЫХ ДАННЫХ В ЗАДАЧАХ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

# Н. В. Попова, А. К. Меньшикова (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Описывается прикладная программа EFRVIEWER. Программа предназначена для просмотра, редактирования и обработки данных, которые являются результатами численного моделирования физических процессов по прикладным программным комплексам РФЯЦ-ВНИИЭФ и представляются в виде бинарных файлов унифицированного формата ЕФР. Являясь своего рода сервисной утилитой, EFRVIEWER через графический интерфейс открывает пользователю доступ к двоичному коду задачи в удобной форме посредством гипертекста, таблиц и графиков.

*Ключевые слова:* библиотека ЕФР, формат ЕФР, пользовательский интерфейс, разрез, задача, область, временной шаг, массив, сетка, числовой анализ, просмотр, редактирование, поиск, сравнение, неоднородный вычислительный комплекс.

#### Введение

Важную роль в решении задач численного моделирования физических процессов на разностных сетках играют средства анализа результатов счета. Эффективная визуальная проверка дает возможность оценить качество сеток в задачах, получить информацию о распределении веществ на сетках, об изменениях функций физических величин во времени и пространстве (программы ZOOM [1], ScientificView [2], ParaView [3], ЛОГОС.ПРЕПОСТ [4]). Параллельно с графическими данными, определенными на структурированных или неструктурированных сетках, для более детального анализа используется их табличное представление [5—7].

Программа EFRVIEWER [8], описание которой приводится ниже, помимо всех указанных возможностей, обладает средствами модификации и обработки данных. К таким средствам авторы относят арифметическое преобразование, замену значений на константу, числовое сравнение, поиск экстремальных значений и значений по условию отношения к константе, вычисление интегральных величин, выделение фрагмента расчетной сетки с распределением величин, объединение фрагментов различных задач в единый *разрез*.

Приложение EFRVIEWER предназначено для работы на ПЭВМ под управлением операционной системы MS Windows. В основу программы заложены объектно-ориентированная библиотека визуальных компонентов VCL [9] и библиотека прямого доступа к разрезам ЕФР [10]. Библиотека VCL используется для создания пользовательского интерфейса и взаимодействия с операционной системой. Библиотека ЕФР обеспечивает доступ к массивам значений физических величин и т. п. Доступ к удаленным файлам неоднородного вычислительного комплекса (НВК) РФЯЦ-ВНИИЭФ возможен, например, через программный сервер Samba [11] по протоколу SMB/CIFS, для которого EFRVIEWER выступает в роли клиента.

# Классификация функциональных возможностей программы

На рис. 1 изображена модульная структура программы EFRVIEWER. Под модулем понимается программная реализация множества функциональных возможностей, классифицированных с точки зрения области применения.



Рис. 1. Модульная структура программы

Модуль просмотра данных реализует возможности табличного просмотра массивов и списков областей, а также получения информации о структуре разреза задачи в виде гипертекста, поддерживающего ассоциативные связи между объектами, выделенными на экране.

Модуль редактирования данных содержит средства модификации параметров, характеризующих задачу, счетные области и их объекты, а также средства коррекции элементов массивов и списков и средства восстановления данных.

Модуль преобразования данных состоит из функций арифметического преобразования элементов целого или вещественного типов, а также функций смещения данных вдоль одного из пространственных направлений структурированной сетки, задаваемых индексами *i*, *j*, *k*.

Модуль поиска значений содержит средства:

- поиска экстремумов величин, определенных на сетке в заданном множестве узлов или ячеек, включая поиск таких значений для заданного набора веществ;
- расчета интегральных и усредненных по области величин с заданием фрагмента счетной области;
- поиска множества элементов, удовлетворяющих заданному условию отношения к константе, и вывода на экран таблицы данных из массивов и списков с выделением маркером найденных значений или печати этих значений в окне вывода.

Модуль сравнения данных обеспечивает сопоставление данных, полученных по различным прикладным программным комплексам или при разных режимах счета, с предоставлением результата сравнения в текстовом или гипертекстовом протоколе.

Модуль композиции данных позволяет скомпоновать новый файл формата ЕФР из множества разрезов задач, в том числе объединить данные из разрезов различных прикладных комплексов.

Модуль экспорта данных обеспечивает возможность сохранения данных из разреза в текстовом файле, который может быть открыт любым текстовым редактором или приложением MS Excel для дальнейших действий (составления отчетов, дополнительных расчетов, построения графиков), а также позволяет выделять фрагмент структурированной сетки задачи с сохранением в отдельном файле формата ЕФР.

Модуль подготовки данных для визуализации содержит средства по формированию данных, определенных на трехмерных структурированных сетках, о счетной области, сечении, слое, изоповерхности для отображения средствами программы графического анализа ZOOM. В него также включаются средства подготовки графиков функций одной переменной (временные зависимости, профили величин) для отображения визуализатором APS [12].

*Модуль пакетной обработки данных* позволяет выполнять:

- обработку данных, взятых из набора временных разрезов, для уменьшения трудозатрат пользователей;
- подготовку данных о границах счетных областей для создания анимации физических процессов;
- расчет интегральных и усредненных по области величин с возможностью сохранения в разрезах.

#### Пользовательский интерфейс

Программа EFRVIEWER является приложением с многодокументным интерфейсом, представленным в виде форм. Форма — типичное окно Windows, контейнер, в котором размещаются другие компоненты. Родительская форма приложения состоит из главного меню, панелей инструментов, панели состояния, окна диагностики и клиентской области для размещения дочерних форм. Каждая дочерняя форма представляет разрез задачи. Такая модель приложения позволяет работать с множеством разрезов в одном экземпляре программы.

**Табличный просмотр данных.** Ключевым средством анализа числовых данных, предоставляемым программой, является просмотр значений массивов и списков из разреза, выведенных на экран в табличном виде (рис. 2).

Для перехода к произвольному элементу массива или списка предусмотрены графические компоненты для задания матричных индексов или порядкового номера элемента. Предусмотрены компоненты для управления транспонированием таблицы и порядком нумерации строк и столбцов (по возрастанию или убыванию).

Для просмотра трехмерных и кратных массивов данных, определенных на структурированной сетке, или трехмерных массивов данных, не связанных с сеткой, предусмотрены компоненты выбора пространственного индекса и значения кратности. Под кратностью подразумевается дополнительное измерение сеточного массива. Кратность используется в том случае, когда каждому элементу массива соответствует несколько однотипных величин, объединенных в одну группу имен (например, объемная или массовая концентрация вещества в ячейке). Количество таких величин определяет кратность.

Вещественные числа отображаются в таблице в одном из трех возможных форматов. Формат задается в настройках приложения.

**Редактирование начальных данных задач.** Для модификации составляющих разреза в программе EFRVIEWER реализованы:

- редактирование параметров задачи, области, массива или списка;
- замена значений, выделенных в таблице, на другое значение;
- замена значений фрагмента, заданного индексами, на другое значение;
- множественная замена значений по условию сравнения;
- копирование и вставка значений.

Для исключения ошибочных ситуаций предусмотрен режим оповещения пользователя о его

⊕ 1  ⊕ 1 ⊕ 1  ⊕ 1  ⊕ 1 ⊕ 1  ⊕ 1	Raparer Rocrom reger ⊂ 1 ⊂ J , G K	пра проснопра теаци Знателени и недоков NK 1 - Султости - Султости - Султости -	У Оси	ertse politiktopolitikke Sekreteke 0000000000004-d2 IRK/Exampler/EFR/blog	Ppanier Hacces/cncva       II     12/10       J1     12/20       K1     K2/20				
R*2Keaper pasiejce	-	Массив 4000 × (МІХ = 100.00000; МАХ = 200.000000)							
I 1933 Anay Adap		11	12	13	14	15			
回 間 Cruccu (1)	J1	2.00000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.111111111111111e+02	1.222222222222222e+02	1.333333333333333e+02			
E 100 Frag_Map	32	2.000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.1111111111111111e+02	1 2222222222222220+02	1 333333333333333e+02			
B J. Bperservice war Nº 0	13	2.000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.111111111111111e+02	1 2222222222222220+02	1.333333333333333e+02			
E Cerovele Hacolesi (5)	J 4	2.000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.111111111111111e+02	1 22222222222222220+02	1 333333333333333e+02			
+ 4001 Y	J 5	2.000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.111111111111111e+02	1 2222222222222220+02	1 333333333333333e+02			
+ 4002.2	J6	2.000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.11111111111111111e+02	1 22222222222222220+02	1 3333333333333339+02			
-11 5000 Matter	J7	2.000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.11111111111111111e+02	1 22222222222222222+02	1.3333333333333333e+02			
R*2Keaper papiyoe	J8	2 000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.111111111111111111e+02	1 222222222222222220+02	1 3333333333333339+02			
Historia Materia Marca (1)	19	2 000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.111111111111111111e+02	1.22222222222222220	1 3333333333333334+02			
В - Пр Списки (1)	J 10	2.0000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.11111111111111111e+02	1 22222222222222220+02	1.3333333333333333e+02			
Stop Frag Map	J 11	2 000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.11111111111111111e+02	1 2222222222222220+02	1 3333333333333339+02			
E J. Bpervervick war Nº 0	J 12	2.000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.11111111111111111e+02	1 2222222222222222220+02	1.3333333333333333e+02			
П Сеточные массием (5)	J 13	2.000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.111111111111111111e+02	1 222222222222222220+02	1 3333333333333333e+02			
+ 4000×	J14	2 000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.11111111111111111111e+02	1 222222222222222222	1 3333333333333333+02			
-+ 4002Z	J 15	2.000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.111111111111111e+02	1 222222222222222e+02	1 3333333333333333e+02			
-11 5000 Malter -11 5017 Cell Adap	J 16	2.000000000000000e+02	1.0000000000000000e+02	1.1111111111111111e+02	1 222222222222222e+02	1 333333333333333e+02			
R*2Keaper papejos	J17	2.0000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.1111111111111111e+02	1 2222222222222220+02	1 3333333333333333e+02			
Э П Многонерные массием (1)	J 18	2 000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.1111111111111111e+02	1 222222222222222e+02	1 333333333333333e+02			
B ( Coccia (1)	J 19	2 000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.1111111111111111e+02	1 2222222222222220+02	1.333333333333333e+02			
B100 Frag, Map	J 20	2.000000000000000e+02	1.000000000000000e+02	1.1111111111111111e+02	1 222222222222220+02	1.3333333333333339+02			

Рис. 2. Табличный просмотр данных разреза

намерении внести изменение в разрез, а также средство восстановления исходных данных возврат на один шаг назад.

**Преобразование данных.** В программе реализованы следующие способы преобразования данных:

- преобразование по арифметическому выражению для данных целого и вещественного типов (рис. 3);
- смещение данных, определенных на структурированной сетке, вдоль одного из пространственных направлений, задаваемых индексами.

Параметры арифметического преобразования задаются во вспомогательном диалоге. Параметрами являются знак арифметической операции и константа в качестве правого инфиксного операнда. Программа производит сложение, умножение, вычитание или деление и сохраняет новые значения в файле-разрезе.

Множественный поиск значений по условию. Одним из методов числового анализа является поиск элементов массивов и списков счетных областей по условию отношения к заданному значению. Параметрами поиска являются константа, операция отношения к константе (больше, меньше, равно, не равно, больше или равно, меньше или равно), точность сравнения вещественных чисел. Возможен последовательный поиск элементов, а также поиск всех элементов.

Результат представляется двумя способами: отображением значений в окне вывода или выделением маркером в таблице данных (рис. 4). В окне вывода значения характеризуются матричными индексами элементов с указанием объекта, счетной области и временного шага.

**Сравнение данных задач.** Средствами программы EFRVIEWER производится числовое сравнение:

- содержимого разрезов по математической постановке задач;
- содержимого разрезов по физической постановке задач;
- директорий.

Сравнение разрезов по математической постановке подразумевает строгое и нестрогое сопоставление данных, а также попарное сравнение объектов. В роли объектов выступают область, временной шаг, массив, список. Строгое сопоставление означает сравнение файлов по структурам: размерность и другие параметры задачи; количество областей, идентификаторы областей, размер, тип сетки и другие параметры области; количество временных шагов, номера шагов интегрирования, количество массивов и списков каждого шага; идентификаторы массивов и списков, их размер, тип данных и другие параметры; значения элементов. Нестрогое сопоставление означает сравнение содержимого файлов по объектам с одинаковыми идентификаторами.

Сравнение разрезов по физической постановке подразумевает расчет разницы между значениями физических величин (массы, объема, плотности, внутренней энергии, кинетической энергии) для каждого вещества. Протокол сравнения формируется в html-формате с рассчитанными балансами и результатом сопоставления физических величин.



Рис. 3. Арифметическое преобразование данных



Рис. 4. Поиск значений по условию с выделением маркером (1) и отображением в окне вывода (2)

Сравнение директорий — сопоставление содержимого множества разрезов одной директории и содержимого множества разрезов другой директории. Разрезы сравниваются по принципу каждый с каждым или по идентичным названиям.

Параметры сравнения задаются пользователем через компоненты графического интерфейса программы. Но часто требуется проводить автоматическое сопоставление разрезов без участия пользователя, например, в процессе тестирования некоторого счетного комплекса при обновлении эталона в качестве валидации полученных результатов. Поэтому модуль сравнения выделен в отдельную программу с интерфейсом командной строки для использования на НВК РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Выделение слоя структурированной сетки. Актуальной является функция выделения слоя трехмерной структурированной сетки в отдельный файл ЕФР. Под слоем сетки размерностью  $NI \times NJ \times NK$  узлов понимается одно из множеств {(i = const, j, k):  $1 \le i < NI$ ,  $1 \le \le j < NJ$ ,  $1 \le k < NK$ }; {(i, j = const, k):  $1 \le \le i < NI$ ,  $1 \le j < NJ$ ,  $1 \le k < NK$ }; {(i, j, k = = const):  $1 \le i < NI$ ,  $1 \le j < NJ$ ,  $1 \le k < NK$ }; {(i, j, k = = const):  $1 \le i < NI$ ,  $1 \le j < NJ$ ,  $1 \le k < NK$ }. Параметрами являются номер счетной области с расчетной сеткой (или весь набор счетных областей) и номер слоя по одному из пространственных направлений. Реализовано множественное выделение данных.

Композиция данных. В программе реализован модуль для составления (композиции) файла ЕФР из объектов, входящих в состав произвольных разрезов (рис. 5). В роли объектов выступают счетные области, массивы значений физических величин. Пользователю для удобства предоставлен некий базовый разрез, к которому можно добавлять фрагменты данных, а также их исключать.

При добавлении области пространственная размерность сетки должна соответствовать размерности задачи. При добавлении сеточного массива его размер должен соответствовать параметрам сетки области.

Представление об иерархии объектов составляемого разреза можно получить с помощью структурированного дерева, выводимого в окне диалога для задания параметров композиции. Полную информацию о параметрах объектов дает предварительный просмотр в виде гипертекста, который формируется по нажатию соответствующей кнопки диалога.



Рис. 5. Диалог для задания параметров композиции данных

#### Заключение

Описано сервисное приложение EFRVIEWER, которое предоставляет средства анализа и проверки начальных и расчетных данных, имеющих двоичное представление в формате EФP, в удобном для пользователя виде посредством дружественного графического интерфейса.

Программа, пройдя стадии формирования требований, проектирования, реализации, тестирования и внедрения, находится на этапе эксплуатации и сопровождения в течение девяти лет. Авторы благодарят специалистов прикладных программных комплексов РФЯЦ-ВНИИЭФ за ее использование в их научной деятельности.

# Список литературы

1. *Царева Т. В., Башуров В. В.* Графический визуализатор ZOOM // Науч. конф. "XI Нижегородская сессия молодых специалистов": Тез. докл. Красный плес, 22 мая — 25 мая 2006 г. С. 41—42.

- Потехин А. Л., Тарасов В. И, Фирсов С. А. и др. ScientificView — параллельная система постобработки результатов, полученных при численном моделировании физических процессов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 4. С. 37—45.
- 3. Henderson A., Ahrens J., Law C. et al. The ParaView Guide. USA, Kitware Inc., 2004.
- 4. Фархутдинов В. Ф., Тарасов В. И., Соловьёв А. Н. и др. Обзор возможностей по обработке геометрий и построению сеточных моделей в ЛОГОС.ПРЕПОСТ // Сб. докл. XIII межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 524—533.

- Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бахрах С. М. и др. Интегрированная система сопровождения счета задач в пакете программ ЛЭГАК-3D // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 4. С. 35—43.
- Гагарин С. В., Дедкова К. В., Комоско В. В. и др. Сервисная система для многозадачного анализа результатов счета задач математической физики // Там же. 2005. Вып. 1. С. 111—116.
- Будников В. И., Линник Д. М. Пакет сервисных программ для трехмерного параллельного комплекса Д // Там же. 2001. Вып. 4. С. 65—68.
- Попова Н. В., Деманова А. К. Программа EFRVIEWER как средство быстрого анализа результатов численного моделирования физических процессов // Сб. докл. VI науч.-техн. конф. "Молодежь в науке". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 155—159.

- 9. Архангельский А. Я. Программирование в C++Builder 6. М.: Изд-во БИНОМ, 2003.
- Волгин А. В., Красов А. В., Кузнецов М. Ю., Тарасов В. И. Библиотека ЕФР для универсального представления расчетных данных // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Вып. 11. С. 130—135.
- Бруксбэнк Э., Хабербергер Дж., Дойл Л. Samba. Руководство системного администратора. Сер. Для профессионалов. С.-Пб.: Питер, 2001.
- 12. Гребенников А. Н., Фарафонтов Г. Г., Алексеев А. В. и др. Технология подготовки групповых и макроскопических констант и методика их уточнения в процессе расчета задач переноса нейтронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 4. С. 15—24.

Статья поступила в редакцию 27.12.12.

# содержание

Гаджиев А. Д., Кошутин Д. А., Ше-	Gadzhiev A. D., Koshutin D. A., Shes-
стаков А. А. Метод дискретных ординат	takov A. A. The method of discrete ordi-
с TVD-реконструкцией и синтетический	nates with TVD-reconstruction and a syn-
метод ускорения итераций для численно-	thetic method of iteration acceleration for
го решения уравнения переноса теплово-	the numerical solution of heat transport
го излучения	equation
Исакова А. С., Карлыханов Н. Г. Срав- нительный анализ квазидиффузионного подхода и метода усредненных косину- сов для решения кинетического уравне- ния переноса излучения	Isakova A. S., Karlykhanov N. G. Com- parative analysis of the quasi-diffusion ap- proach and method of averaged cosines for solving radiation transport equations 16
Хищенко К. В., Чарахчьян А. А. Об одном свойстве двух симметрично схо- дящихся плоских волн термоядерного горения	Khishchenko K. V., Charakhchian A. A. About one feature of two symmetrically converging plane waves of fusion burn 30
Конюхов В. М., Савельев А. А., Храм-	Konyukhov V. M., Saveliev A. A., Khram-
ченков М. Г., Чекалин А. Н., Галиулли-	chenkov M. G., Chekalin A. N., Galiul-
на Н. Е. Математическая и численная	lina N. E. Mathematical and numerical
модели склонового стока дождевых осад-	models of the overland runoff of rainfalls
ков на поверхности водосбора речной	on the river systems drainage surface 41
сети	Voronov G. I., Trushchin V. D., Shu- milin V. V., Yezhov D. V. S-MPI software system for the development, optimization and execution of parallel applications on su- percomputer clusters
компьютерных кластерных системах 55	Baiduraev A. V., Sapronov C. I. Implemen-
Байдураев А. В., Сапронов С. И. Реали-	tation of process binding tools in MPI li-
зация средств привязки процессов в биб-	brary to improve the performance of paral-
лиотеке MPI для повышения производи-	lel applications
тельности параллельных приложений 61 Федоров В. К., Киселев С. Н. Отладчик параллельных приложений (PDB) 65	Fedorov V. K., Kiselev S. N. Parallel appli- cation debugger (PDB)
Попова Н. В., Меньшикова А. К. Про-	Popova N. V., Menshikova A. K. EFRVIE-
грамма EFRVIEWER для числового ана-	WER program for numerical analy-
лиза начальных и расчетных данных в	sis of original and calculated data
задачах численного моделирования фи-	in numerical simulation of physical
зических процессов	processes

CONTENTS

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы	Н. Ю. Зимакова, Е. Н. Старченко	Корректоры	В. В. Барышникова А. В. Федоренко
Подписан	ю в печать 05.08.13		Формат 60×84/8

Усл. печ. л. ~ 10

Зак. тип. 2182-2012 8 статей Индекс 3642

Уч.-изд. л. ~ 13

Учредитель: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ" Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-29789 от 04 октября 2007 г.

Офсетн. печ.

Тираж 1000 экз.

Оригинал-макет подготовлен в Математическом отделении ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ" 607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23 УДК 517.958:536.2

МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ОРДИНАТ С ТVD-РЕКОНСТ-РУКЦИЕЙ И СИНТЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД УСКОРЕНИЯ ИТЕ-РАЦИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕ-НОСА ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ / А. Д. Гаджиев, Д. А. Кошутин, А. А. Шестаков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 3—15.

Разработка эффективного численного метода решения уравнения переноса теплового излучения является сложной проблемой. В работе рассмотрена новая методика для численного решения одномерного уравнения переноса теплового излучения. Суть нового подхода состоит в применении метода дискретных ординат с TVDреконструкцией для решения кинетического уравнения и синтетического метода на основе  $P_1$ -приближения для ускорения сходимости итераций при совместном решении уравнения переноса и уравнения энергии (рис. 3, табл. 4, список лит. — 11 назв.).

*Ключевые слова:* перенос излучения, TVD-схема, итерационный метод.

#### УДК 519.6:536.71

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КВАЗИДИФФУЗИОННОГО ПОДХОДА И МЕТОДА УСРЕДНЕННЫХ КОСИНУСОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗ-ЛУЧЕНИЯ / А. С. Исакова, Н. Г. Карлыханов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 16—29.

На примере расчета задач, имеющих аналитическое решение, проведено исследование свойств решений кинетического уравнения, полученных методом квазидиффузии и методом усредненных косинусов. Показано, что метод усредненных косинусов может давать менее точный результат по сравнению с квазидиффузионным подходом. На основе проведенного анализа предлагается способ комбинирования методов усредненных косинусов и квазидиффузии, когда в каждой точке пространства автоматически выбирается тот подход, который дает наибольшую точность (рис. 15, табл. 3, список лит. — 6 назв.).

*Ключевые слова:* перенос излучения, квазидиффузия, TVD-подход, одномоментные уравнения переноса с усредненными косинусами.

### УДК 533.9

ОБ ОДНОМ СВОЙСТВЕ ДВУХ СИММЕТРИЧНО СХОДЯ-ЩИХСЯ ПЛОСКИХ ВОЛН ТЕРМОЯДЕРНОГО ГОРЕНИЯ / К. В. Хищенко, А. А. Чарахчьян // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 30—40.

Рассматривается одномерная задача об одновременном симметричном воздействии двух одинаковых лазерных импульсов на плоский слой твердого DT-горючего. Исследованы два варианта с разной начальной плотностью смеси: нормальной  $\rho_s$  при атмосферном давлении и  $5\rho_s$ . Задача ставится для уравнений односкоростной двухтемпературной гидродинамики с учетом электронной и ионной теплопроводности, собственного излучения плазмы и нагрева горючего  $\alpha$ -частицами первичной DT-реакции и лазерным излучением, которое полностью поглощается в окрестности точки с критической плотностью. Основным предметом исследования являются сходящиеся к плоскости симметрии волны термоядерного горения, возникающие при некотором выборе толщины слоя и параметров лазерного излучения.

Показано, что такие волны обладают интересным свойством: перед волной горения возникает течение со сжимающим профилем скорости  $u(x,t) = \varphi(t)x$ , где тангенс угла наклона  $|\varphi| = -\varphi$  по пространственной координате x растет со временем t. В результате происходит быстрое сжатие относительно холодного горючего перед волной. Для варианта с начальной плотностью  $5\rho_s$  горючее перед фронтом сжимается более чем в 100 раз, достигая значения плотности, сравнимого с тем, которое предполагается получать с помощью первого драйвера в рамках концепции быстрого поджига. Коэффициент усиления по энергии нейтронов DT-реакции равен  $\sim 45$  для варианта с начальной плотностью  $\rho_s$  и  $\sim 500$  для варианта с начальной плотностью  $\rho_s$  и  $\sim 25$  назв.).

Ключевые слова: управляемый инерционный синтез, волна медленного горения, волна термоядерного горения, течения с линейным профилем скорости.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛИ СКЛОНО-ВОГО СТОКА ДОЖДЕВЫХ ОСАДКОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ВОДОСБОРА РЕЧНОЙ СЕТИ / В. М. Конюхов, А. А. Савельев, М. Г. Храмченков, А. Н. Чекалин, Н. Е. Галиуллина // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 41—54.

Рассматриваются вопросы математического и численного моделирования склонового стока дождевых осадков на поверхности водосбора речной сети. Математическая модель включает в себя уравнения двумерной кинематической волны, отражающие пространственно-временные изменения толщины водного слоя на поверхности водосбора с учетом осадков и впитывания воды. Для определения содержания влаги в зоне неполного насыщения (почве) предложен приближенный подход, основанный на модели капиллярной пропитки.

Изучены особенности решения поставленной задачи. В частности, показано, что в начальный момент появления жидких осадков склоновый сток не образуется, так как вся вода успевает впитываться в почву. Запаздывающий аргумент и момент появления склонового стока вычисляются из системы алгебраических уравнений. При кратковременном прекращении осадков значение запаздывающего аргумента переопределяется заново в момент их возобновления.

Для численного решения задачи используется метод конечных разностей. Разработана алгоритмическая модель, реализованная в программном комплексе, позволяющем проводить расчеты поверхностного стока. В качестве примера проведено исследование склонового стока бассейна реки Меша Республики Татарстан (рис. 4, список лит. — 17 назв.).

*Ключевые слова:* численное моделирование, кинематическая волна, склоновый сток, поверхность водосбора, зона неполного насыщения, капиллярная пропитка.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС S-МРІ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ РАЗРАБОТКИ, ОПТИМИЗАЦИИ И ВЫПОЛНЕНИЯ ВЫСОКО-ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕР-НЫХ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ / Г. И. Воронов, В. Д. Трущин, В. В. Шумилин, Д. В. Ежов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 55—60.

Для эффективного использования современных кластерных вычислительных систем необходимы эффективные, надежные и удобные в использовании программные комплексы, поддерживающие стандарт MPI-2 и обеспечивающие ускоренную разработку, оптимизацию и выполнение высокопараллельных приложений. При реализации таких программных комплексов приходится решать множество теоретических и практических проблем, наиболее важными из которых являются отказоустойчивость, масштабируемость, адаптация к современным коммуникационным средам и топологии кластеров, поддержка смешанных моделей программирования и т. п.

Описывается разрабатываемый в рамках контракта с Министерством образования и науки РФ отечественный программный комплекс S-MPI, включающий в себя библиотеку S-MPI и программные инструменты для анализа корректности и эффективности параллельных приложений. Приводится сравнение производительности S-MPI и двух других широко распространенных реализаций MPI-2 (Open MPI 1.5.4 и MVAPICH 1.2.7) (рис. 4, список лит. — 10 назв.).

*Ключевые слова:* МРІ, параллельные вычисления, проверка корректности, инструментальные средства анализа.

РЕАЛИЗАЦИЯ СРЕДСТВ ПРИВЯЗКИ ПРОЦЕССОВ В БИБ-ЛИОТЕКЕ МРІ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОС-ТИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ / А. В. Байдураев, С. И. Сапронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 61—64.

Описываются оригинальные программные средства, обеспечивающие закрепление за процессом определенного набора вычислительных ресурсов во время выполнения приложения. Эти программные средства, интегрированные в конкретную реализацию MPI, позволяют параллельным приложениям более эффективно использовать вычислительную среду, что повышает производительность приложений и, следовательно, способствует укреплению конкурентоспособности этой реализации.

Кроме выполнения своей целевой функции, средства привязки собирают большой набор данных о среде выполнения приложения для осуществления широкого спектра информационных услуг. Пользовательский интерфейс средств привязки реализован через механизм переменных среды и опций в командной строке запуска приложения. При этом семантика команд пользователя максимально ориентирована на абстрактную модель многоядерной архитектуры кластера.

Структурная организация исходного кода позволяет достаточно легко интегрировать средства привязки в среду конкретной реализации MPI (рис. 4, список лит. — 7 назв.).

*Ключевые слова:* МРІ, параллельные вычисления, закрепление процессов.

#### УДК 04981.211

ОТЛАДЧИК ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ (PDB) / В. К. Федоров, С. Н. Киселев // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 65–71.

Описываются возможности диалогового отладчика *параллельных* программ. Дается схема взаимодействия программных компонентов, которые составляют отладчик. Представлен пользовательский интерфейс.

Отладчик ориентирован на Unix/Linux платформы. Он обеспечивает отладку программ, написанных на языках программирования С, С++ и Fortran с использованием MPI- и OpenMPстандартов (рис. 4, список лит. — 13 назв.).

*Ключевые слова:* многопроцессорная вычислительная система, отладчик, параллельное приложение.

ПРОГРАММА EFRVIEWER ДЛЯ ЧИСЛОВОГО АНАЛИЗА НАЧАЛЬНЫХ И РАСЧЕТНЫХ ДАННЫХ В ЗАДАЧАХ ЧИС-ЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ / Н. В. Попова, А. К. Меньшикова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 3. С. 72–78.

Описывается прикладная программа EFRVIEWER. Программа предназначена для просмотра, редактирования и обработки данных, которые являются результатами численного моделирования физических процессов по прикладным программным комплексам РФЯЦ-ВНИИЭФ и представляются в виде бинарных файлов унифицированного формата ЕФР. Являясь своего рода сервисной утилитой, EFRVIEWER через графический интерфейс открывает пользователю доступ к двоичному коду задачи в удобной форме посредством гипертекста, таблиц и графиков (рис. 5, список лит. — 12 назв.).

Ключевые слова: библиотека ЕФР, формат ЕФР, пользовательский интерфейс, разрез, задача, область, временной шаг, массив, сетка, числовой анализ, просмотр, редактирование, поиск, сравнение, неоднородный вычислительный комплекс. THE METHOD OF DISCRETE ORDINATES WITH TVD-RECON-STRUCTION AND A SYNTHETIC METHOD OF ITERATION AC-CELERATION FOR THE NUMERICAL SOLUTION OF HEAT TRANSPORT EQUATION / A. A. Gadzhiev, D. A. Koshutin, A. A. Shestakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 3—15.

The development of an effective numerical scheme to solve the heat transport equation is a complex problem. The paper describes a new technique for the numerical solution of 1D heat transport equation. The idea of this new approach consists in applying the method of discrete ordinates with TVD-reconstruction to solve the transport equation and a synthetic method on the base of  $P_1$ -application to accelerate convergence of iterations when solving the transport equation together with the energy equation.

Key words: radiation transport, TVD-scheme, iterative method.

COMPARATIVE ANALYSIS OF QUASI-DIFFUSION APPROACH AND METHOD OF AVERAGED COSINES FOR SOLVING THE RADIATION TRANSPORT EQUATION / A. S. Isakova, N. G. Karlykhanov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 16–29.

Properties of the transport equation solutions obtained with the quasi-diffusion method and method of averaged cosines were studied by the example of problems having analytical solutions. It is shown that the method of averaged cosines can give a less accurate result in comparison with the quasi-diffusion method. Basing on the comparative analysis the paper offers to use a combination of the two methods, i.e. at each point of space preference is automatically given to the method providing the highest accuracy of solution.

Key words: radiation transport, quasi-diffusion, TVD-approach, single transport equations with averaged cosines. ABOUT ONE FEATURE OF TWO SIMMETRICALLY CONVERG-ING PLANE WAVES OF FUSION BURN / K. V. Khishchenko, A. A. Charakhchian // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 30-40.

The paper considers a 1D problem of two equal laser pulses simultaneously and symmetrically impacting a plane solid DT-fuel layer. There have been studied two options with different initial densities of mixture: normal density  $\rho_s$  at atmospheric pressure and density  $5\rho_s$ . The problem is set up for equations of single-speed two-temperature hydrodynamics with regard to electron and ion heat conduction, intrinsic plasma emission, and fuel heating by  $\alpha$ -particles from the primary DT-reaction and laser radiation, which is absorbed completely in the vicinity of point with critical density. The study is focused on fusion burn waves converging to the plane of symmetry and emerging at some choice of the layer thickness and laser radiation parameters.

It is shown that such waves have an interesting feature: a flow with compression velocity profile  $u(x,t) = \varphi(t)x$ , where tangent of slope angle  $|\varphi| = -\varphi$  increases with time t with respect to space coordinate x, occurs in front of the combustion wave. As a result, quick compression (relative to a cold fuel) takes place in front of the wave. With the initial density of fuel  $5\rho_s$ , the density of fuel in front of the wave becomes 100 times (and even more) higher and comparable with the density expected from the use of the first driver according to the concept of quick ignition. The neutron energy gain of DT-reaction is ~ 45 for initial density  $\rho_s$  and ~ 500 for initial density  $5\rho_s$ .

Key words: inertial confinement fusion, slow combustion wave, fusion burn wave, flows with linear velocity profile.

MATHEMATICAL AND NUMERICAL MODELS OF THE OVER-LAND RUNOFF OF RAINFALLS ON THE RIVER SYSTEM'S DRAINAGE SURFACE / V. M. Konyukhov, A. A. Saveliev, M. G. Khramchenkov, A. N. Chekalin, N. E. Galiullina // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 41-54.

The mathematical modeling and numerical simulation issues are considered for the overland runoff of rainfalls on the river system's drainage surface. A mathematical model includes equations of a 2D kinematic wave, space-and-time variations of the water layer thickness on the drainage surface with regard to rainfalls and water absorption. The paper offers an approximate approach based on the capillary imbibition model to determine the water content in subsaturation area (soil).

The specific features of solutions to the problem have been studied. It is shown, in particular, that no overland runoff is generated at initial time of liquid falls because water is completely absorbed by soil. The retarded argument and the overland runoff origination time are calculated from the algebraic equation system. If rainfalls continue after a short period of no falls the retarded argument value should be recalculated.

The finite-difference method is used to solve the problem numerically. An algorithmic model has been developed and implemented in the software system that allows the surface water runoff calculations. The paper gives an example of studies for the overland runoff in the Mesha river basin in the Republic of Tatarstan.

Key words: numerical simulation, kinematic wave, overland runoff, drainage surface, subsaturation area, capillary imbibition.

S-MPI SOFTWARE SYSTEM FOR THE DEVELOPMENT, OPTI-MIZATION AND EXECUTION OF PARALLEL APPLICATIONS ON SUPERCOMPUTER CLUSTERS / G. I. Voronov, V. D. Trushchin, V. V. Shumilin, D. V. Yezhov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 55-60.

Effective, reliable and easy-to-use software systems that support MPI-2 standard and provide quick development, optimization and execution of massively parallel applications are needed to effectively use advanced computing clusters. Implementation of such software systems requires resolving a set of theoretic and practical problems and of most importance among them are the problems of scalability, resilience, adaptation to advanced communication environments, etc.

The paper describes S-MPI software system developed under contract with the RF Ministry of Education and Science, which includes S-MPI library and tools for the analysis of validity and efficiency of parallel applications. The S-MPI performance is compared with those of the two other commonly used MPI-2 implementations.

 $Key \ words:$  MPI, parallel computations, validation, tools for analysis.

IMPLEMENTATION OF PROCESS BINDING TOOLS IN MPI LI-BRARY TO IMPROVE THE PERFORMANCE OF PARALLE AP-PLICATIONS / A. V. Baiduraev, S. I. Sapronov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 61—64.

The paper describes original tools providing reservation of certain computational resources for a given process during the application runtime. These tools integrated within the particular MPI implementation allow parallel applications to use the given computation environment more effectively and thereby improve the performances of applications and enhance the given implementation competitiveness.

In addition to their target function, the binding tools collect a large set of data on the application execution environment to provide a wide spectrum of information services. The user interface of tools has been implemented with the mechanism of environment variables and options in a command line used to start up an application. The user command semantics is oriented to an abstract model of the multicore cluster architecture.

The source code structure allows easily integrating binding tools within the particular MPI implementation.

Key words: MPI, parallel computations, allocation, reservation.

PARALLEL APPLICATION DEBUGGER (PDB) / V. K. Fedorov, S. N. Kiselev // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 65-71.

Capabilities of an interactive debugger of parallel applications are described. The interaction pattern is given for the program components of the debugger and the user interface with its main components is described. The paper also presents the user interface.

The debugger is oriented to Unix/Linux platforms. It provides debugging programs written in C, C++, and Fortran with the use of MPI and OpenMP standards.

Key words: multiprocessor computing system, debugger, parallel application.

EFRVIEWER PROGRAM FOR NUMERICAL ANALYSIS OF ORIG-INAL AND CALCULATED DATA IN NUMERICAL SIMULATION OF PHYSICAL PROCESSES / N. V. Popova, A. K. Menshikova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2013. No 3. P. 72–78.

The paper describes EFRVIEWER application. It is intended for viewing, editing and processing data resulted from the numerical simulation of physical processes using the RFNC-VNIIEF application suits and represented in the form of binaries in EFR format. Being a kind of service utility EFRVIEWER provides (via GUI) the user access to the job's binary code in an easy-to-use form by means of hypertext, tables and plots.

Key words: EFR library, EFR format, user interface, job, cutest, time step, domain, array, grid, numerical analysis, viewing, editing, search, comparison, heterogeneous computer complex.