

ISSN 0367-5203

**В**ОПРОСЫ  
**А**ТОМНОЙ  
**Н**АУКИ И  
**Т**ЕХНИКИ

**Российский  
федеральный  
ядерный  
центр –  
ВНИИЭФ**

**СЕРИЯ**

**Математическое моделирование  
физических процессов**

**2015**

**ВЫПУСК 3**

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.

Саров — 2015

Главный редактор

Шагалиев Рашит Мирзагалиевич, доктор физ.-мат. наук, снс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Заместитель главного редактора:

Тишкин Владимир Федорович, доктор физ.-мат. наук, профессор (ИММ РАН, г. Москва)

Ответственный секретарь

Соколовская Елена Валентиновна (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Члены редколлегии:

Барте́нев Ю́рий Герма́нович, доктор физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Быков Александр Николаевич, кандидат физ.-мат. наук (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Залялов Наиль Надырович, кандидат физ.-мат. наук (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Иванов Николай Владимирович, кандидат физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Ковалев Валерий Леонидович, доктор физ.-мат. наук, профессор

(МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва),

Козманов Михаил Юрьевич, доктор физ.-мат. наук, снс (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск),

Соловьев Александр Александрович, доктор физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Спирidonov Валентин Федорович, доктор физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Холостов Алексей Александрович (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Чекалин Анатолий Николаевич, доктор физ.-мат. наук, доцент

(НИИММ им. Н. Г. Чеботарева, КФУ, г. Казань),

Чубариков Владимир Николаевич, доктор физ.-мат. наук, профессор

(МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва)

Адрес редакции: 607188, г. Саров Нижегородской обл.,

пр. Мира, 37, тел. (83130)28406,

*e-mail*: sokol@vniief.ru

УДК 517.956+519.635.8+533.6.011+534.22

## ВЛИЯНИЕ СПОСОБА УЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА УСТОЙЧИВОСТЬ СЧЕТА ДВУХЭТАПНОЙ ГАЗОДИНАМИЧЕСКОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ

Ю. А. Бондаренко

(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Проведено с учетом теплопроводности исследование устойчивости двухэтапной разностной схемы счета газовой динамики в переменных Лангранжа. Получено, что условия на шаг по времени типа Куранта сильно зависят от способа использования в разностной схеме неявной теплопроводности. В большинстве случаев условие устойчивости определяется изэнтропической скоростью звука. Предложена модификация с учетом неявной теплопроводности в двух уравнениях энергии. В условиях устойчивости модифицированной схемы присутствует непрерывный переход от изэнтропической скорости звука к изотермической при увеличении теплового числа Куранта.

*Ключевые слова:* газовая динамика с теплопроводностью, разностные схемы, расщепление по физическим процессам, устойчивость разностных схем, изэнтропическая скорость звука, изотермическая скорость звука, тепловая дисперсия звука.

### Введение

В условиях устойчивости типа Куранта для разностных схем счета газовой динамики в переменных Лагранжа [1, 2] обычно используется изэнтропическая скорость звука  $c_S$ . В то же время известно [3, 4], что в газовой динамике с "сильной" теплопроводностью скорость распространения коротковолновых возмущений близка к изотермической скорости звука  $c_T$ . Изотермическая скорость звука меньше изэнтропической:  $c_T = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{T=\text{const}}} < c_S = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{S=\text{const}}}$ . Поэтому, взяв в условии типа Куранта изотермическую скорость звука, получим шаг по времени больше, чем при использовании изэнтропической скорости звука.

Для уравнения состояния  $p = (\gamma - 1)\rho E$ ,  $E = E_T T$ ,  $\gamma = \text{const} > 1$ ,  $E_T = \text{const} > 0$ , имеем  $c_T/c_S = \gamma^{-1/2} < 1$ . Для одноатомного газа  $\gamma = 5/3$  изотермическая скорость звука меньше изэнтропической приблизительно в 1,3 раза. Но в высокотемпературном случае, когда вещество находится в равновесии с излучением, эффект может быть большим. Для уравнения состояния идеального газа с равновесным излучением [5]

$$P(\rho, T) = (\gamma - 1)\rho C_V T + \frac{\sigma T^4}{3}; \quad E(\rho, T) = C_V T + \frac{\sigma T^4}{\rho};$$

$$\gamma = \text{const} > 1; \quad C_V = \text{const} > 0; \quad \sigma = 1,373$$
(1)

зависимости отношения изэнтропической скорости звука к изотермической от температуры приведены на рис. 1. Видно, что переход в газодинамических условиях устойчивости типа Куранта от изэнтропической скорости звука к изотермической может дать серьезное удешевление расчетов, когда имеются вещества с низкой плотностью  $\rho$  и высокой температурой  $T$ .

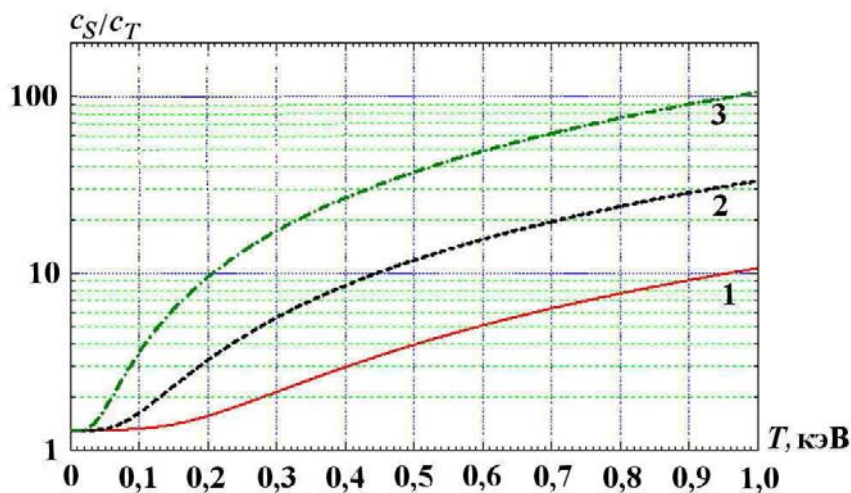


Рис. 1. Отношение изэнтропической скорости звука к изотермической в зависимости от температуры для уравнения состояния (1) идеального газа с излучением ( $\gamma = 5/3$ ,  $C_V = 8,25$ ): 1 —  $\rho = 10^{-3}$ ; 2 —  $\rho = 10^{-4}$ ; 3 —  $\rho = 10^{-5}$

Нужны формулы, описывающие непрерывный переход от одной скорости звука к другой по мере "усиления" теплопроводности. Но известные из акустики зависимости скорости звука в газах от теплопроводности [3] могут не соответствовать условиям устойчивости конкретной разностной схемы. Настоящая работа посвящена исследованию влияния теплопроводности на устойчивость двухэтапной разностной схемы типа *предиктор—корректор* счета газовой динамики в переменных Лагранжа. Во избежание громоздких формул ограничимся одномерным плоским случаем и равномерными по массе сетками без учета вязкости.

### Фазовая скорость звука в дифференциальных уравнениях газовой динамики с учетом теплопроводности (одномерный случай)

Уравнения одномерной плоской газовой динамики в переменных Лагранжа с учетом теплопроводности имеют вид

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{\partial u}{\partial m}; \quad \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial m}; \quad \frac{dE}{dt} = -p \frac{\partial u}{\partial m} + \frac{\partial}{\partial m} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial m} \right). \quad (2)$$

Здесь  $t$  — время;  $m = \int^x \rho(t, x) dx$  — массовая лагранжева координата;  $\eta = \rho^{-1}$  — удельный объем;  $\rho$  — плотность;  $u$  — скорость;  $p$  — давление;  $E$  — внутренняя энергия единицы массы;  $T$  — температура;  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности (считаем его постоянным). Уравнения состояния берем в следующих формах:

$$p = P(\rho, E) = P(\eta, E) = P(\rho, T) = P(\eta, T); \quad E = E(\rho, T) = E(\eta, T); \quad T = T(\rho, E) = T(\eta, E). \quad (3)$$

Для малых возмущений состояния покоя, пренебрегая квадратичными по малым возмущениям слагаемыми, из (2) получаем линейную систему

$$\frac{d\delta\eta}{dt} = \frac{\partial\delta u}{\partial m}; \quad \frac{d\delta u}{dt} = -\frac{\partial\delta p}{\partial m}; \quad \frac{d\delta E}{dt} = -p_0 \frac{\partial\delta u}{\partial m} + \frac{\partial}{\partial m} \left( \kappa \frac{\partial\delta T}{\partial m} \right), \quad (4)$$

которая замыкается соотношениями (линеаризацией уравнений состояния (3))

$$\delta p = P_\eta \delta \eta + P_E \delta E; \quad \delta E = E_\eta \delta \eta + E_T \delta T. \quad (5)$$

Здесь и далее используются обозначения для величин, которые считаем постоянными:

$$\begin{aligned} P_\eta &= \frac{\partial P(\eta, E)}{\partial \eta} < 0; \quad P_E = \frac{\partial P(\eta, E)}{\partial E}; \quad E_\eta = \frac{\partial E(\eta, T)}{\partial \eta}; \quad E_T = \frac{\partial E(\eta, T)}{\partial T} > 0; \\ a_S^2 &= (\rho c_S)^2 = -P_\eta + p P_E > 0; \quad a_T^2 = (\rho c_T)^2 = -P_\eta - P_E E_\eta > 0; \quad 0 < c_T < c_S; \quad 0 < a_T < a_S; \quad (6) \\ \varepsilon_T &= \frac{a_T}{a_S} = \frac{c_T}{c_S}; \quad 0 < \varepsilon_T < 1; \quad Q = \frac{\kappa}{E_T} > 0. \end{aligned}$$

Величины  $a_S$  и  $a_T$  — изэнтропическая и изотермическая массовые скорости звука;  $c_S$  и  $c_T$  — изэнтропическая и изотермическая обычные скорости звука;  $Q$  — коэффициент температуропроводности.

После подстановки в (4) и (5) решения в виде  $\delta f(t, m) = \delta f_0 e^{i(\omega t - \xi m)}$  получаем дисперсионное уравнение

$$(i\omega) \left[ (i\omega)^2 + \xi^2 a_S^2 \right] + \xi^2 Q \left[ (i\omega)^2 + \xi^2 a_T^2 \right] = 0. \quad (7)$$

Ограничимся рассмотрением зависимости частоты  $\omega$  от вещественного волнового числа  $\xi$ , как это обычно делается в математике и в разностных схемах для гиперболических задач при изучении фазовой ошибки (разностной дисперсии) и ошибки диссипации [6—9]. Будем называть *фазовой скоростью* величину

$$a(\xi) = \frac{\operatorname{Re}(\omega(\xi))}{\xi}, \quad \operatorname{Im}(\xi) = 0, \quad \xi \neq 0, \quad (8)$$

а величину  $\lambda(\xi) = \operatorname{Im}(\omega(\xi))$ ,  $\operatorname{Im}(\xi) = 0$ ,  $\xi \neq 0$ , будем называть *скоростью диссипации*. Обычно используемое в акустике [3, 4] решение дисперсионного уравнения для вещественной частоты  $\operatorname{Im}(\omega) = 0$ , когда рассматриваются комплексные волновые числа  $\xi(\omega) = \psi(\omega) - i\Gamma(\omega)$ , в настоящей работе не потребуется.

**Лемма 1.** Для ненулевых вещественных волновых чисел  $\xi$  корни  $\omega(\xi)$  дисперсионного уравнения (7) обладают следующими свойствами:

1. Все корни  $\omega = \omega_{1,2,3}(\xi)$  уравнения (7) являются комплексными (невещественными), лежат в верхней полуплоскости, и верна оценка

$$0 < \operatorname{Im}(\omega) < \xi^2 Q, \quad \forall \xi \neq 0 : \operatorname{Im}(\xi) = 0. \quad (9)$$

2. Один корень  $\omega_1(\xi)$  — всегда чисто мнимый, с положительной мнимой частью; он описывает стоячее затухающее возмущение.
3. Если выполнено условие

$$4(\xi^2 Q^2 a_T - a_S^3)^2 + \xi^2 Q^2 (3a_T - a_S)^3 (a_T + a_S) > 0, \quad \operatorname{Im}(\xi) = 0, \quad (10)$$

то остальные два корня имеют одинаковую по абсолютной величине ненулевую вещественную часть с разными знаками и одинаковую мнимую часть:

$$\omega_{2,3}(\xi) = \pm \xi a(\xi) + i\lambda(\xi), \quad a(\xi) > 0, \quad \lambda(\xi) > 0; \quad (11)$$

они описывают распространяющиеся с фазовой скоростью  $\pm a(\xi)$  затухающие волны. Условие (10) выполнено для всех ненулевых вещественных  $\xi$  тогда и только тогда, когда

$$3a_T > a_S. \quad (12)$$

4. Если вещественные волновые числа  $\xi \neq 0$  удовлетворяют условию

$$4(\xi^2 Q^2 a_T - a_S^3)^2 + \xi^2 Q^2 (3a_T - a_S)^3 (a_T + a_S) \leq 0, \quad \text{Im}(\xi) = 0, \quad (13)$$

то все три корня  $\omega_{1,2,3}(\xi)$  дисперсионного уравнения (7) будут чисто мнимыми, с положительной мнимой частью; они описывают три типа стоячих волн. Такие вещественные волновые числа  $\xi$  существуют тогда и только тогда, когда

$$3a_T \leq a_S. \quad (14)$$

Если неравенство (14) выполнено в строгом смысле, то условие (13) удовлетворяется для всех  $\xi$  из некоторого интервала ненулевой длины.

Пример наличия диапазона длин волн с нулевой фазовой скоростью показан ниже на рис. 3. В литературе по акустике упоминаний этого факта автор не нашел, возможно, потому что в акустике не рассматриваются среды, в которых  $c_T < c_S/3$ .

**Доказательство леммы.** Вместо (7) рассмотрим уравнение

$$z^3 + z^2 \xi^2 Q + z \xi^2 a_S^2 + \xi^4 Q a_T^2 = 0, \quad z = i\omega. \quad (15)$$

Оценка (9) в утверждении 1 доказывается применением критерия Рауса—Гурвица [10] к (15) и к уравнению, которое получается заменой  $z = -(x + \xi^2 Q)$ . Утверждение 2 тогда очевидно.

Утверждения 3 и 4 сводятся к выяснению, когда уравнение (15) имеет два невещественных корня или таких не имеет. Для этого находится дискриминант  $D = q^2 + p^3$  приведенного уравнения  $y^3 + 3py + 2q = 0$ . Уравнение (15) будет иметь одно вещественное решение и два невещественных тогда и только тогда, когда дискриминант строго положительный:  $D = q^2 + p^3 > 0$  [11], откуда получаем (10). Неравенство (12) получается из леммы 6 (см. Приложение) для  $x = \xi^2 Q^2$  в (10). После этого утверждение 4 очевидно.

Фазовая скорость распространяющихся затухающих волн (11) обладает ожидаемыми свойствами в длинноволновом и коротковолновом пределах:

$$a(\xi) \xrightarrow{|\xi Q| \rightarrow +0} (a_S - 0); \quad a(\xi) \xrightarrow{|\xi| \rightarrow \infty} a_T; \quad \lambda(\xi) \xrightarrow{|\xi| \rightarrow \infty} \lambda_\infty = \frac{a_S^2 - a_T^2}{2Q}.$$

На чисто техническом доказательстве этих свойств останавливаться не будем.

### Базовая двухэтапная разностная схема для одномерной газовой динамики

Опишем двухэтапную разностную схему, которая аппроксимирует уравнения (2), пока без учета теплопроводности. Искусственные вязкости учитывать не будем (обычно их значения просто прибавляются к соответствующим давлениям). Это некоторая модификация разностной схемы типа Ладагина—Пастушенко [12], двумерное обобщение которой используется в методике МИМОЗА [13]. В одномерном плоском случае эта схема определяется разностными уравнениями, которые записаны в порядке их использования:

$$\frac{u_j^{n+\sigma} - u_j^n}{\sigma\tau} = -\frac{p_{j+1/2}^n - p_{j-1/2}^n}{\Delta m_j}; \quad (16)$$

$$\frac{X_j^{n+\sigma} - X_j^n}{\sigma\tau} = u_j^{n+\sigma}; \quad (17)$$

$$\eta_{j-1/2}^{n+\sigma} \equiv \frac{1}{\rho_{j-1/2}^{n+\sigma}} = \frac{X_j^{n+\sigma} - X_{j-1}^{n+\sigma}}{\Delta m_{j-1/2}}; \quad (18)$$

$$\frac{E_{j-1/2}^{n+\sigma} - E_{j-1/2}^n}{\sigma\tau} = -p_{j-1/2}^n \frac{u_j^{n+\sigma} - u_{j-1}^{n+\sigma}}{\Delta m_{j-1/2}}; \quad (19)$$

$$p_{j-1/2}^{n+\sigma} = P\left(\rho_{j-1/2}^{n+\sigma}, E_{j-1/2}^{n+\sigma}\right); \quad (20)$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = -\frac{p_{j+1/2}^{n+\sigma} - p_{j-1/2}^{n+\sigma}}{\Delta m_j}; \quad (21)$$

$$\frac{X_j^{n+1} - X_j^n}{\tau} = u_j^{n+(1/2)} \equiv \frac{u_j^n + u_j^{n+1}}{2}; \quad (22)$$

$$\eta_{j-1/2}^{n+1} \equiv \frac{1}{\rho_{j-1/2}^{n+1}} = \frac{X_j^{n+1} - X_{j-1}^{n+1}}{\Delta m_{j-1/2}}; \quad (23)$$

$$\frac{E_{j-1/2}^{n+1} - E_{j-1/2}^n}{\tau} = -p_{j-1/2}^{n+\sigma} \frac{u_j^{n+(1/2)} - u_{j-1}^{n+(1/2)}}{\Delta m_{j-1/2}}; \quad (24)$$

$$p_{j-1/2}^{n+1} = P\left(\rho_{j-1/2}^{n+1}, E_{j-1/2}^{n+1}\right). \quad (25)$$

Постоянный параметр  $\sigma$  удовлетворяет условию

$$2\sigma \geq 1. \quad (26)$$

Уравнения (16)–(20) образуют первый этап (предиктор), уравнения (21)–(25) – второй этап (корректор). Массы узлов и ячеек сетки, как обычно, связаны соотношениями  $\Delta m_j = 0,5 (\Delta m_{j-1/2} + \Delta m_{j+1/2})$ .

### Устойчивость двухэтапной разностной схемы счета газовой динамики, в которой неявная теплопроводность учтена распределенным диффузионным источником энергии

Рассмотрим способ учета неявной теплопроводности, который принят при счете газовой динамики с теплопроводностью в методике МИМОЗА [14]. В этом способе перед счетом газодинамики решается неявное уравнение теплопроводности

$$\dot{E}_{j-1/2}^{n+1/2} = \frac{\hat{E}_{j-1/2}^{n+1} - E_{j-1/2}^n}{\tau} = \frac{1}{\Delta m_{j-1/2}} \left( \kappa_j \frac{\hat{T}_{j+1/2}^{n+1} - \hat{T}_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta m_j} - \kappa_{j-1} \frac{\hat{T}_{j-1/2}^{n+1} - \hat{T}_{j-3/2}^{n+1}}{\Delta m_{j-1}} \right), \quad (27)$$

$$\hat{E}_{j-1/2}^{n+1} = E\left(\rho_{j-1/2}^n, \hat{T}_{j-1/2}^{n+1}\right), \quad (28)$$

но "новые" температуры  $\hat{T}_{j-1/2}^{n+1}$  и внутренние энергии  $\hat{E}_{j-1/2}^{n+1}$  не запоминаются. Запоминается только распределенный диффузионный источник энергии, который используется при счете газовой динамики в уравнениях для внутренней энергии (19) и (24) в виде

$$\frac{E_{j-1/2}^{n+\sigma} - E_{j-1/2}^n}{\sigma\tau} = -p_{j-1/2}^n \frac{u_j^{n+\sigma} - u_{j-1}^{n+\sigma}}{\Delta m_{j-1/2}} + \dot{E}_{j-1/2}^{n+1/2}; \quad (29)$$

$$\frac{E_{j-1/2}^{n+1} - E_{j-1/2}^n}{\tau} = -p_{j-1/2}^{n+\sigma} \frac{u_j^{n+(1/2)} - u_{j-1}^{n+(1/2)}}{\Delta m_{j-1/2}} + \dot{E}_{j-1/2}^{n+1/2}. \quad (30)$$

Получившуюся в результате разностную схему для последующих ссылок запишем в виде следующей цепочки формул, используемых на одном шаге по времени:

$$[(27), (28)] \longrightarrow [(16)–(18)] \longrightarrow (29) \longrightarrow [(20)–(23)] \longrightarrow (30) \longrightarrow (25). \quad (31)$$



Для исследования устойчивости, прежде всего, из системы разностных уравнений (31), часть которых нелинейная, надо получить линейную систему для малых возмущений состояния покоя. При этой линеаризации сразу воспользуемся обозначениями (6) и предположением о постоянстве всех термодинамических величин из (6). Предполагаем также, что массы всех ячеек сетки и узлов сетки одинаковые:

$$\Delta m_j = \Delta m_{j-1/2} = \Delta m, \quad \forall j. \quad (32)$$

Тогда из формул цепочки вычислений (31) получаем следующую систему линейных конечно-разностных уравнений для малых возмущений состояния покоя:

$$\delta \dot{E}_{j-1/2}^{n+1/2} = \frac{\delta \hat{E}_{j-1/2}^{n+1} - \delta E_{j-1/2}^n}{\tau} = \frac{\kappa}{\Delta m^2} \left( \delta \hat{T}_{j+1/2}^{n+1} - 2\delta \hat{T}_{j-1/2}^{n+1} + \delta \hat{T}_{j-3/2}^{n+1} \right); \quad (33)$$

$$\delta \hat{E}_{j-1/2}^{n+1} = E_\eta \delta \eta_{j-1/2}^n + E_T \delta \hat{T}_{j-1/2}^{n+1}; \quad (34)$$

$$\frac{\delta u_j^{n+\sigma} - \delta u_j^n}{\sigma \tau} = - \frac{\delta p_{j+1/2}^n - \delta p_{j-1/2}^n}{\Delta m}; \quad (35)$$

$$\frac{\delta X_j^{n+\sigma} - \delta X_j^n}{\sigma \tau} = \delta u_j^{n+\sigma}; \quad (36)$$

$$\delta \eta_{j-1/2}^{n+\sigma} = \frac{\delta X_j^{n+\sigma} - \delta X_{j-1}^{n+\sigma}}{\Delta m}; \quad (37)$$

$$\frac{\delta E_{j-1/2}^{n+\sigma} - \delta E_{j-1/2}^n}{\sigma \tau} = -p \frac{\delta u_j^{n+\sigma} - \delta u_{j-1}^{n+\sigma}}{\Delta m} + \delta \dot{E}_{j-1/2}^{n+1/2}; \quad (38)$$

$$\delta p_{j-1/2}^{n+\sigma} = P_\eta \delta \eta_{j-1/2}^{n+\sigma} + P_E \delta E_{j-1/2}^{n+\sigma}; \quad (39)$$

$$\frac{\delta u_j^{n+1} - \delta u_j^n}{\tau} = - \frac{\delta p_{j+1/2}^{n+\sigma} - \delta p_{j-1/2}^{n+\sigma}}{\Delta m}; \quad (40)$$

$$\frac{\delta X_j^{n+1} - \delta X_j^n}{\tau} = \delta u_j^{n+(1/2)} = \frac{\delta u_j^n + \delta u_j^{n+1}}{2}; \quad (41)$$

$$\delta \eta_{j-1/2}^{n+1} = \frac{\delta X_j^{n+1} - \delta X_{j-1}^{n+1}}{\Delta m}; \quad (42)$$

$$\frac{\delta E_{j-1/2}^{n+1} - \delta E_{j-1/2}^n}{\tau} = -p \frac{\delta u_j^{n+(1/2)} - \delta u_{j-1}^{n+(1/2)}}{\Delta m} + \delta \dot{E}_{j-1/2}^{n+1/2}; \quad (43)$$

$$\delta p_{j-1/2}^{n+1} = P_\eta \delta \eta_{j-1/2}^{n+1} + P_E \delta E_{j-1/2}^{n+1}; \quad (44)$$

$$\delta E_{j-1/2}^{n+1} = E_\eta \delta \eta_{j-1/2}^{n+1} + E_T \delta \hat{T}_{j-1/2}^{n+1}. \quad (45)$$

Ищем решение линейной системы уравнений (33)–(45) в виде гармоник Фурье

$$\begin{aligned} \delta f_j^{n+k} &= \delta f(t^{n+k}, m_j) = \delta f^{n+k} e^{-i\xi j \Delta m}, \quad k = 0, \sigma, 1; \quad \delta f^{n+1} = \lambda \delta f^n; \\ \delta g_{j-1/2}^{n+k} &= \delta g(t^{n+k}, m_{j-1/2}) = \delta g^{n+k} e^{-i\xi(j-1/2)\Delta m}, \quad k = 0, \sigma, 1; \quad \delta g^{n+1} = \lambda \delta g^n. \end{aligned} \quad (46)$$

Здесь  $\lambda$  есть собственное (комплексное) значение оператора перехода разностной схемы (33)–(45), а вещественное волновое число  $\xi$  — любое, удовлетворяющее ограничению

$$0 < \zeta = \xi \Delta m \leq \pi. \quad (47)$$

Подставляем решения (46) в систему (33)–(45). Затем исключаем амплитуды малых возмущений промежуточных величин  $\delta f^{n+\sigma}$  и  $\delta g^{n+\sigma}$ , после этого исключаем амплитуды малых возмущений давлений, внутренних энергий, удельных объемов и вспомогательной температуры  $\delta \hat{T}^{n+1}$ . В результате получается линейная однородная система трех уравнений для амплитуд возмущений координат, скорости и температуры (соответствующие длинные выкладки опускаем). Приравнявая определитель

этой системы нулю (чтобы она имела нетривиальное решение), получаем кубическое характеристическое уравнение для собственных значений  $\lambda$

$$b_3 \lambda^3 + b_2 \lambda^2 + b_1 \lambda + b_0 = 0, \quad (48)$$

вещественные коэффициенты которого имеют вид

$$b_3 = 1 > 0; \quad (49)$$

$$b_2 = -3 + (K + 4\sigma \chi_S^2 s^2) + 2 \left[ (1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2) - \sigma K (1 - \varepsilon_T^2) \right] \chi_S^2 s^2; \quad (50)$$

$$b_1 = 3 - 2K - 4\sigma (2 - K) \chi_S^2 s^2 + 2K \varepsilon_T^2 (1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2) \chi_S^2 s^2; \quad (51)$$

$$b_0 = -(1 - K) \left\{ 1 - 2 \left[ (2\sigma - 1) + 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2 \right] \chi_S^2 s^2 \right\} - 2K (1 - \sigma - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2) (1 - \varepsilon_T^2) \chi_S^2 s^2. \quad (52)$$

Здесь использованы обозначения (см. также (6) и (47))

$$\chi_S = \frac{\tau \rho c_S}{\Delta m}; \quad \chi_T = \frac{\tau \rho c_T}{\Delta m}; \quad \chi_K = \frac{\tau \kappa}{E_T \Delta m^2}; \quad 0 < K = \frac{4s^2 \chi_K}{1 + 4s^2 \chi_K} < 1; \quad 0 < s = \sin \frac{\zeta}{2} \leq 1, \quad (53)$$

где величины  $\chi_S$ ,  $\chi_T$  и  $\chi_K$  называем изэнтропическим, изотермическим и тепловым числами Куранта соответственно. Считаем, что  $s > 0$  (при  $s = 0$  имеем  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 1 - K$ ).

**Теорема 1.** Устойчивость системы линейных разностных уравнений (33)–(45) эквивалентна устойчивости корней характеристического кубического уравнения (48)–(52) для всех  $s \in (0, 1]$ . Предполагаем выполненными ограничения (см. (6), (26) и (53))

$$\chi_S > 0; \quad 0 < \varepsilon_T < 1; \quad 0 < s \leq 1; \quad 2\sigma \geq 1; \quad 0 \leq K < 1. \quad (54)$$

1. Чтобы разностная схема была нестрогой устойчивой, необходимо выполнение неравенства

$$2\sigma \chi_S = 2\sigma \frac{\tau \rho c_S}{\Delta m} \leq 1. \quad (55)$$

2. Обратно, строгое неравенство

$$2\sigma \chi_S = 2\sigma \frac{\tau \rho c_S}{\Delta m} < 1 \quad (56)$$

достаточно для нестрогой устойчивости разностной схемы (33)–(45).

Необходимое (55) и достаточное (56) условия нестрогой устойчивости не зависят от значений изотермической скорости звука  $c_T$  и коэффициента теплопроводности  $\kappa$ . Условие нестрогой устойчивости схемы (33)–(45) не зависит от того, учитывается или нет теплопроводность, и допустимый шаг по времени не удастся увеличить по сравнению с обычным изэнтропическим условием Куранта.

**Доказательство теоремы.** В условиях устойчивости корней кубического многочлена (леммы 4 и 5 из Приложения) вместо самих коэффициентов (49)–(52) кубического многочлена (48) фигурируют их линейные комбинации

$$a_3 = b_3 - b_2 + b_1 - b_0 = 4(2 - K)(1 - 2\sigma \chi_S^2 s^2); \quad (57)$$

$$a_0 = b_3 + b_2 + b_1 + b_0 = 4K(1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2) \chi_S^2 s^2 \varepsilon_T^2; \quad (58)$$

$$a_2 = 3b_3 - b_2 - b_1 + 3b_0 = 4 \left[ K + 4\sigma(1 - K) \chi_S^2 s^2 - (2 - K)(1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2) \chi_S^2 s^2 \right] + 4K \left[ (2\sigma - 1) + 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2 \right] (1 - \varepsilon_T^2) \chi_S^2 s^2 > 0; \quad (59)$$

$$a_1 = 3b_3 + b_2 - b_1 - 3b_0 = 8 \left[ \sigma K \varepsilon_T^2 + (1 - K \varepsilon_T^2)(1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2) \right] \chi_S^2 s^2. \quad (60)$$

Из (59) с учетом (54) получаем

$$a_2|_{K=0} = 8 [(2\sigma - 1) + 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2] \chi_S^2 s^2 > 0;$$

$$a_2|_{K=1} = 4 \left[ \frac{16\sigma^2 - 1}{16\sigma^2} + \left( 2\sigma \chi_S^2 s^2 - \frac{1}{4\sigma} \right)^2 \right] + 4 [(2\sigma - 1) + 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2] (1 - \varepsilon_T^2) \chi_S^2 s^2 > \frac{16\sigma^2 - 1}{4\sigma^2} > 0.$$

Линейно зависящая от  $K$  функция  $a_2(K)$  положительна при  $K = 0$  и  $K = 1$ . Поэтому  $a_2(K)$  положительна при всех  $0 \leq K \leq 1$ .

В случае  $K = 0$  уравнение (48) принимает вид

$$(\lambda - 1) \left\{ (\lambda - 1)^2 + 2 [2\sigma (\lambda - 1) + (\lambda + 1) (1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2)] \chi_S^2 s^2 \right\} = 0.$$

Корень  $\lambda = 1$  этого уравнения лежит на единичной окружности. К оставшемуся уравнению  $(\lambda - 1)^2 + 2 [2\sigma (\lambda - 1) + (\lambda + 1) (1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2)] \chi_S^2 s^2 = 0$  применим лемму 2 из Приложения и получим необходимые и достаточные условия нестрогой устойчивости, которые сводятся к одному неравенству  $4\sigma^2 \chi_S^2 s^2 \leq 1, \forall s \in (0, 1]$ , что эквивалентно условию (55).

Поэтому дальше рассмотрим случай  $0 < K < 1$ .

Докажем с помощью леммы 4 из Приложения необходимость условия (55) для нестрогой устойчивости. Требование (П3) после подстановки (57) принимает вид  $2\sigma \chi_S^2 s^2 \neq 1$ . Считаем его выполненным. Так как  $a_2 > 0$  (см. (59)), условие (П5) сводится к неравенству  $a_3 \geq 0$ . Поэтому с учетом (57) и (58) из (П5) и (П6) получаем два условия:  $1 - 2\sigma \chi_S^2 s^2 > 0$  и  $(1 - 2\sigma \chi_S^2 s^2) (1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2) \geq 0$ , которые вместе дают условие  $1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2 \geq 0$ , эквивалентное (55). В случае  $2\sigma \chi_S^2 s^2 = 1$  условия (П9) из второй части леммы 4 (см. Приложение) после подстановки (49)–(51) и исключения  $s$  принимают вид, не противоречащий (55).

Для доказательства второй части теоремы 1 рассмотрим неравенства (П10)–(П12) из леммы 5 (см. Приложение), совокупность которых гарантирует нестрогую устойчивость. Так как  $a_2 > 0$  (см. (59)), из (П10) получаем  $a_3 > 0$ , затем из (П11) получаем  $a_0 > 0$ . Условия  $a_3 > 0$  и  $a_0 > 0$  после подстановки (57), (58) и учета (54) принимают вид  $2\sigma \chi_S^2 s^2 < 1$  и  $4\sigma^2 \chi_S^2 s^2 < 1$  для  $\forall s : 0 < s \leq 1$ , они эквивалентны (56).

Осталось доказать справедливость (П12) из леммы 5 при выполнении неравенства (56) и предположений (54) для  $K \neq 0$ . Выражение (П12) после подстановки (57)–(60) и преобразований принимает (после отбрасывания положительных множителей) вид

$$f_a(X, Y, Z) = \frac{\sigma^2}{4\chi_S^2 s^2} (a_1 a_2 - a_0 a_3) = B_0(Y, Z) + X B_1(Y, Z) + X^2 B_2(Y, Z) + X^3 B_3(Y, Z), \quad (61)$$

где многочлены четвертой степени от двух переменных  $Y$  и  $Z$  имеют вид

$$B_0(Y, Z) = (a + 1)^2 [aZ + (2 - YZ)] YZ;$$

$$B_1(Y, Z) = (a + 1) [4 + 2aZ - (4a + 10)YZ + YZ^2 + (a + 4)Y^2 Z^2];$$

$$B_2(Y, Z) = -4(a + 2) + 2(a + 1)Z + 6(a + 2)YZ - (a + 1)YZ^2 - (3a + 5)Y^2 Z^2;$$

$$B_3(Y, Z) = 2(1 - YZ)(2 - YZ)$$
(62)

и использованы обозначения

$$X = 1 - 4\sigma^2 \chi_S^2 s^2, \quad 0 < X < 1; \quad Y = \varepsilon_T^2, \quad 0 < Y < 1; \quad Z = K, \quad 0 < Z < 1; \quad 2\sigma = a + 1, \quad a \geq 0. \quad (63)$$

Фактически надо проверить положительность многочлена (61) седьмой степени от трех аргументов  $X, Y, Z$  строго внутри единичного куба (условие (56) эквивалентно ограничению  $X > 0$ ,

остальные условия (63) следуют при  $K \neq 0$  из ограничений (54)). Положительность (61) легко проверяется строго внутри граней  $X = 0$ ,  $X = 1$ ,  $Y = 0$  и  $Z = 0$ , а также в ближайшей окрестности грани  $X = 0$  (при  $0 < X \ll 1$ ), где справедлива оценка

$$f_a(X, Y, Z) \geq 4(a + 1)X + O(X^2) = 8\sigma X + O(X^2) > 0, \quad 0 < X \ll 1, \quad 0 \leq Y \leq 1, \quad 0 \leq Z \leq 1.$$

Проверка строгой положительности функции  $f_a(X, Y, Z)$  во всех точках внутри единичного куба осуществлена численно (все вычисления и визуализация выполнены с помощью пакета программ ORIGIN 6.1 [15]). С помощью равномерно распределенного на единичном отрезке датчика случайных чисел внутренность единичного куба относительно равномерно была заполнена точками с общим числом  $4 \cdot 10^5$ . Еще по  $10^5$  точек было размещено в окрестностях (в слоях толщиной  $10^{-2}$ ) каждой из шести граней единичного куба со сгущением к границам куба. В итоге было взято  $10^6$  точек строго внутри единичного куба. В каждой такой точке по формулам (61), (62) вычислено значение функции  $f_a(X, Y, Z)$ . Такие вычисления проведены для значений  $\sigma$  из отрезка  $0,5 \leq \sigma \leq 1$  с шагом по  $\sigma$ , равным 0,05, и для ряда значений  $\sigma > 1$ , вплоть до значения  $\sigma = 100$ . Все вычисленные таким способом точки отображаются графически на плоскости  $(X, f_a)$ . Пример такого графика дан на рис. 2.

Все точки функции  $f_a(X, Y, Z)$ , использованные в счете, для всех опробованных значений  $\sigma \geq 0,5$  лежат в верхней полуплоскости. Полученные численные результаты доказывают строгую положительность функции  $f_a(X, Y, Z)$  внутри единичного куба, что и завершает доказательство теоремы 1.

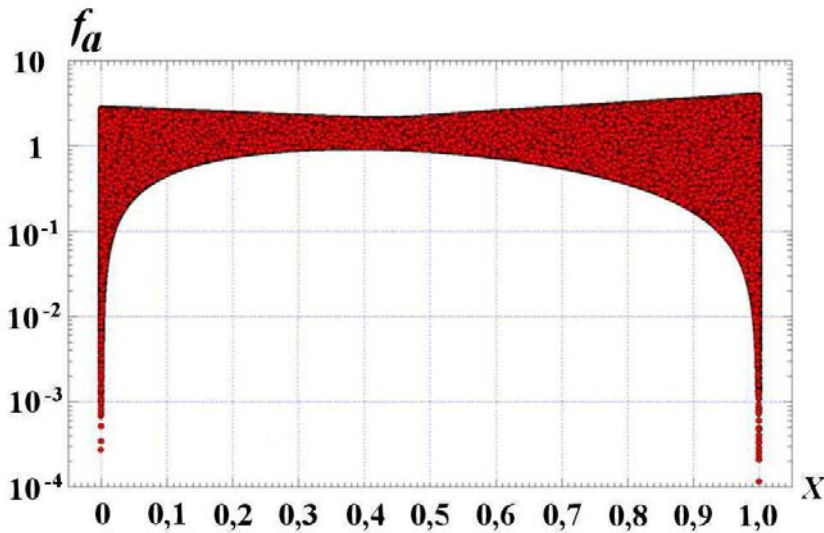


Рис. 2. Значения функции  $f_a(X, Y, Z)$  из (61) при  $\sigma = 0,7$

### Двухэтапная разностная схема с прямым учетом теплопроводности в уравнениях для энергии

После теоремы 1 естественно возникает желание рассмотреть более традиционные способы учета неявной теплопроводности, что в двухэтапной газодинамической разностной схеме (16)–(25) можно сделать несколькими способами.

Рассмотрим схему с прямым учетом неявной теплопроводности в двух уравнениях для внутренней энергии. Для этого разностные уравнения (19) и (24) заменяем следующими:

$$\frac{E_{j-1/2}^{n+\sigma} - E_{j-1/2}^n}{\sigma \tau} = -p_{j-1/2}^n \frac{u_j^{n+\sigma} - u_{j-1}^{n+\sigma}}{\Delta m_{j-1/2}} + \frac{\beta}{\Delta m_{j-1/2}} \left( \kappa_j \frac{T_{j+1/2}^{n+\sigma} - T_{j-1/2}^{n+\sigma}}{\Delta m_j} - \kappa_{j-1} \frac{T_{j-1/2}^{n+\sigma} - T_{j-3/2}^{n+\sigma}}{\Delta m_{j-1}} \right), \beta \geq 0; \quad (64)$$

$$E_{j-1/2}^{n+\sigma} = E \left( \rho_{j-1/2}^{n+\sigma}, T_{j-1/2}^{n+\sigma} \right); \quad (65)$$

$$\frac{E_{j-1/2}^{n+1} - E_{j-1/2}^n}{\tau} = -p_{j-1/2}^{n+\sigma} \frac{u_j^{n+(1/2)} - u_{j-1}^{n+(1/2)}}{\Delta m_{j-1/2}} + \frac{1}{\Delta m_{j-1/2}} \left( \kappa_j \frac{T_{j+1/2}^{n+1} - T_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta m_j} - \kappa_{j-1} \frac{T_{j-1/2}^{n+1} - T_{j-3/2}^{n+1}}{\Delta m_{j-1}} \right); \quad (66)$$

$$E_{j-1/2}^{n+1} = E \left( \rho_{j-1/2}^{n+1}, T_{j-1/2}^{n+1} \right). \quad (67)$$

Вводит в диффузионный член уравнения (66) множитель, отличный от единицы (для увеличения общности), нельзя, так как это нарушит аппроксимацию.

Будем называть получившуюся в результате однопараметрическую разностную схему *двухэтапной схемой с теплопроводностью в двух уравнениях энергии*, или короче, *схемой с теплопроводностью в двух уравнениях энергии*. Запишем ее в виде цепочки номеров формул, используемых на одном шаге по времени:

$$[(16)–(18)] \longrightarrow [(64), (65)] \longrightarrow [(20)–(23)] \longrightarrow [(66), (67)] \longrightarrow (25). \quad (68)$$

При линеаризации разностной схемы (68) для малых возмущений состояния покоя воспользуемся предположением (32), обозначениями (6) и предположением о постоянстве всех термодинамических величин из (6). Тогда из (64)–(67) получим линейные соотношения для малых возмущений:

$$\frac{\delta E_{j-1/2}^{n+\sigma} - \delta E_{j-1/2}^n}{\sigma\tau} = -p \frac{\delta u_j^{n+\sigma} - \delta u_{j-1}^{n+\sigma}}{\Delta m} + \frac{\beta\kappa}{\Delta m^2} \left( \delta T_{j+1/2}^{n+\sigma} - 2\delta T_{j-1/2}^{n+\sigma} + \delta T_{j-3/2}^{n+\sigma} \right); \quad (69)$$

$$\delta E_{j-1/2}^{n+\sigma} = E_\eta \delta \eta_{j-1/2}^{n+\sigma} + E_T \delta T_{j-1/2}^{n+\sigma}; \quad (70)$$

$$\frac{\delta E_{j-1/2}^{n+1} - \delta E_{j-1/2}^n}{\tau} = -p \frac{\delta u_j^{n+(1/2)} - \delta u_{j-1}^{n+(1/2)}}{\Delta m} + \frac{\kappa}{\Delta m^2} \left( \delta T_{j+1/2}^{n+1} - 2\delta T_{j-1/2}^{n+1} + \delta T_{j-3/2}^{n+1} \right); \quad (71)$$

$$\delta E_{j-1/2}^{n+1} = E_\eta \delta \eta_{j-1/2}^{n+1} + E_T \delta T_{j-1/2}^{n+1}. \quad (72)$$

В результате из (68) получается линейная система уравнений для малых возмущений состояния покоя, которая описывается следующей цепочкой номеров формул:

$$[(35)–(37)] \longrightarrow [(69), (70)] \longrightarrow [(39)–(42)] \longrightarrow [(71), (72)] \longrightarrow (44). \quad (73)$$

Ищем решение линейной системы уравнений (73) в виде гармоник Фурье (46). После исключения амплитуд малых возмущений промежуточных величин и последующего исключения амплитуд малых возмущений давлений, внутренних энергий и удельных объемов получается линейная однородная система трех уравнений для амплитуд возмущений координат, скорости и температуры. Приравняв нулю ее определитель, получим кубическое характеристическое уравнение для собственных значений  $\lambda$

$$b_3 \lambda^3 + b_2 \lambda^2 + b_1 \lambda + b_0 = 0, \quad b_3 > 0, \quad (74)$$

вещественные коэффициенты которого имеют вид

$$b_3 = 1 + 4\chi_K s^2 > 0; \quad (75)$$

$$b_2 = -1 - 2(1 - 2\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2)(1 + 4\chi_K s^2) + 2(1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2)[4\chi_T^2 s^2\chi_K s^2 + \chi_S^2 s^2] - 2K_{\beta\sigma}(\chi_S^2 - \chi_T^2)s^2; \quad (76)$$

$$b_1 = 1 + 2(1 - 4\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) + 4[(1 - 4\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) + 2(1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2)\chi_T^2 s^2]\chi_K s^2; \quad (77)$$

$$b_0 = -(1 - 4\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) - 2(1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2)\chi_S^2 s^2 + 2K_{\beta\sigma}(\chi_S^2 s^2 - \chi_T^2 s^2); \quad (78)$$

$$0 \leq K_{\beta\sigma} = \frac{4\beta\sigma s^2\chi_K}{1 + 4\beta\sigma s^2\chi_K} < 1; \quad \chi_{\beta\sigma}^2 = K_{\beta\sigma}\chi_T^2 + (1 - K_{\beta\sigma})\chi_S^2. \quad (79)$$

Случай  $s = 0$ , когда (74) принимает вид  $(\lambda - 1)^3 = 0$ , рассматривать не будем. Не будем также рассматривать случай отсутствия теплопроводности  $\chi_K = 0$ , когда схема (73) совпадает со схемой (33)–(45) с условием устойчивости (55).

Сразу приведем линейные комбинации коэффициентов (75)–(78) уравнения (74), которые фигурируют в формулировках условий нестрогой устойчивости в леммах 4 и 5 (см. Приложение):

$$a_3 = b_3 - b_2 + b_1 - b_0 = 8 (1 - 2\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) (1 + 2\chi_K s^2); \quad (80)$$

$$a_0 = b_3 + b_2 + b_1 + b_0 = 16 (1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) \chi_T^2 s^2 \chi_K s^2; \quad (81)$$

$$a_2 = 3b_3 - b_2 - b_1 + 3b_0 = \\ = 8 [2\chi_K s^2 + 2\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 - (1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) (2\chi_T^2 s^2 \chi_K s^2 + \chi_S^2 s^2) + K_{\beta\sigma} (\chi_S^2 s^2 - \chi_T^2 s^2)] > 0; \quad (82)$$

$$a_1 = 3b_3 + b_2 - b_1 - 3b_0 = 8 [4\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 \chi_K s^2 + (1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) \chi_S^2 s^2 - K_{\beta\sigma} (\chi_S^2 s^2 - \chi_T^2 s^2)]. \quad (83)$$

Строгая положительность (82) следует из (26), (6) и (79).

В случае однократного использования неявной теплопроводности имеет место следующий упрощенный аналог теоремы 1.

**Теорема 2.** *Нестрогая устойчивость системы линейных разностных уравнений (73) эквивалентна нестрогой устойчивости корней характеристического кубического уравнения (74) с коэффициентами (75)–(78) для всех  $s \in (0, 1]$ . Считаем, что выполнены условия (6), (26) и (53). Предполагаем, что неявная теплопроводность учитывается только в одном уравнении для внутренней энергии на втором этапе:*

$$\beta = 0. \quad (84)$$

Тогда для нестрогой устойчивости разностной схемы (73) необходимо выполнение неравенства

$$2\sigma\chi_S = 2\sigma \frac{\tau\rho c_S}{\Delta t} \leq 1. \quad (85)$$

Таким образом, условие нестрогой устойчивости (85) при однократном использовании неявной теплопроводности (84) не зависит от изотермической скорости звука  $c_T$  и от значения теплового числа Куранта  $\chi_K$ .

**Доказательство теоремы.** Из (84) и (79) следует, что  $K_{\beta\sigma} = 0$  и  $\chi_{\beta\sigma}^2 = \chi_S^2$ . Это сильно упрощает формулы (80)–(83). После этого необходимость изэнтропического условия Куранта (85) легко получается применением условий (П5) и (П6) леммы 4 (см. Приложение). Детали опустим, они почти дословно совпадают с аналогичным доказательством необходимости в теореме 1.

**Теорема 3.** *Устойчивость системы линейных разностных уравнений (73) эквивалентна устойчивости корней характеристического кубического уравнения (74) с коэффициентами (75)–(78) для всех  $s \in (0, 1]$ . Считаем, что выполнены условия (6), (26) и (53). Неявная теплопроводность учитывается в обоих уравнениях для внутренней энергии, но*

$$0 < \beta \leq 1. \quad (86)$$

1. Для нестрогой устойчивости разностной схемы (73) необходимо выполнение неравенства

$$2\sigma \frac{\tau\rho}{\Delta t} \sqrt{\frac{4\beta\sigma\chi_K c_T^2 + c_S^2}{1 + 4\beta\sigma\chi_K}} \leq 1. \quad (87)$$

2. Обратно, строгое неравенство

$$2\sigma \frac{\tau\rho}{\Delta t} \sqrt{\frac{4\beta\sigma\chi_K c_T^2 + c_S^2}{1 + 4\beta\sigma\chi_K}} < 1 \quad (88)$$

достаточно для нестрогой устойчивости разностной схемы (73).

Доказательство. Так как  $a_2 > 0$  (см. (82)), то при  $a_3 \neq 0$  (или  $2\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 \neq 1$ , см. (80)) необходимые условия (П5) и (П6) нестрогой устойчивости из леммы 4 (см. Приложение) сводятся к неравенствам  $a_3 \geq 0$  и  $a_0 \geq 0$ . Эти два неравенства с учетом (80) и (81) и предположения  $2\sigma \geq 1$  сводятся к одному:

$$4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 \leq 1, \quad \forall s \in (0, 1]. \quad (89)$$

В случае  $2\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 = 1$  ( $a_3 = 0$ ) легко проверяется, что неравенства (П9) из второй части леммы 4 после подстановки (75)–(77) не изменяют условия (89). Похожими рассуждениями получаем, что два неравенства (П10) и (П11) из леммы 5 (см. Приложение) при  $a_2 > 0$  и  $2\sigma \geq 1$  эквивалентны строгому аналогу условия (89). (89) эквивалентно (87), а строгий аналог (89) эквивалентен (88), так как максимум  $\chi_{\beta\sigma}^2 s^2$  достигается при  $s = 1$ :

$$\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 = \left[ \frac{\chi_T^2}{4\beta\sigma\chi_K} (4\beta\sigma\chi_K s^2 + 1) - \frac{\chi_S^2 - \chi_T^2}{4\beta\sigma\chi_K} \frac{1}{4\beta\sigma\chi_K s^2 + 1} \right] + \frac{\chi_S^2 - 2\chi_T^2}{4\beta\sigma\chi_K}.$$

Для проверки (П12) из леммы 5 при выполнении (88) будем численно проверять положительность значений функции из условия (П12)

$$\begin{aligned} f_\sigma(X, Y, Z, W) = a_1 a_2 - a_0 a_3 = & 8 [4\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 \chi_K s^2 + (1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) \chi_S^2 s^2 - K_{\beta\sigma} (\chi_S^2 s^2 - \chi_T^2 s^2)] \times \\ & \times 8 [2\chi_K s^2 + 2\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 - (1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) (2\chi_T^2 s^2 \chi_K s^2 + \chi_S^2 s^2) + K_{\beta\sigma} (\chi_S^2 s^2 - \chi_T^2 s^2)] - \\ & - 128 (1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) (1 - 2\sigma\chi_{\beta\sigma}^2 s^2) (1 + 2\chi_K s^2) \chi_T^2 s^2 \chi_K s^2. \end{aligned} \quad (90)$$

Функция (90) зависит от величин  $\beta$ ,  $\chi_K s^2$ ,  $\chi_T^2 s^2$ ,  $\chi_{\beta\sigma}^2 s^2$ ,  $\chi_S^2 s^2$ ,  $K_{\beta\sigma}$ , которые удовлетворяют неравенствам (см. (6), (79), (86) и строгий аналог (89))

$$0 < \beta \leq 1; \quad \chi_K s^2 > 0; \quad 0 < \chi_T^2 s^2 < \chi_{\beta\sigma}^2 s^2 < \chi_S^2 s^2; \quad 0 < 1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 < 1; \quad 0 < K_{\beta\sigma} < 1.$$

Эти шесть величин подчинены двум уравнениям (79). В качестве независимых взяты следующие четыре величины, полностью заполняющие единичный четырехмерный куб:

$$0 < X = 1 - 4\sigma^2\chi_{\beta\sigma}^2 s^2 < 1; \quad 0 < Y = \frac{\chi_T^2 s^2}{\chi_{\beta\sigma}^2 s^2} < 1; \quad 0 < Z = K_{\beta\sigma} < 1; \quad 0 < W = \beta \leq 1. \quad (91)$$

Проверка строгой положительности функции  $f_\sigma(X, Y, Z, W)$  во всех точках внутри четырехмерного единичного куба осуществлена численно (вычисления и визуализация выполнены с помощью пакета программ ORIGIN 6.1 [15]). С помощью равномерно распределенного на единичном отрезке датчика случайных чисел внутренность четырехмерного единичного куба сначала относительно равномерно была заполнена точками с общим числом  $2 \cdot 10^5$ . Еще по  $10^5$  точек было размещено в окрестностях (в слоях толщиной  $10^{-2}$ ) каждой из восьми граней (трехмерных кубиков  $X = 0$ ,  $X = 1$ ,  $Y = 0$ ,  $Y = 1$ ,  $Z = 0$ ,  $Z = 1$ ,  $W = 0$ ,  $W = 1$ ) единичного куба со сгущением к границам четырехмерного единичного куба. В итоге взято  $10^6$  точек строго внутри единичного куба. Для каждой такой точки по формулам (90), (91) вычислено значение функции  $f_\sigma(X, Y, Z, W)$ , причем дважды. Второй раз в описанном наборе точек вычислены значения функции  $f_\sigma(X, Y, Z, W)|_{W=1}$ , чтобы гарантировать надежность вычислений для  $\beta = 1$ .

Такие вычисления были проведены для значений  $\sigma$  из отрезка  $0,5 \leq \sigma \leq 1$  с шагом по  $\sigma$ , равным 0,05, и для ряда значений  $\sigma > 1$ , вплоть до значения  $\sigma = 100$ . Все вычисленные таким способом точки отображаются графически на плоскости  $(X, f_\sigma)$ . Пример такого графика показан на рис. 3.

Абсолютно все точки функции  $f_\sigma(X, Y, Z, W)$ , использованные в счете, для всех опробованных значений  $\sigma \geq 0,5$  лежат в верхней полуплоскости. Полученные численные результаты доказывают строгую положительность функции  $f_\sigma(X, Y, Z, W)$  как внутри четырехмерного единичного куба, так и на его трехмерной грани  $W = \beta = 1$ . Это завершает доказательство теоремы 3.

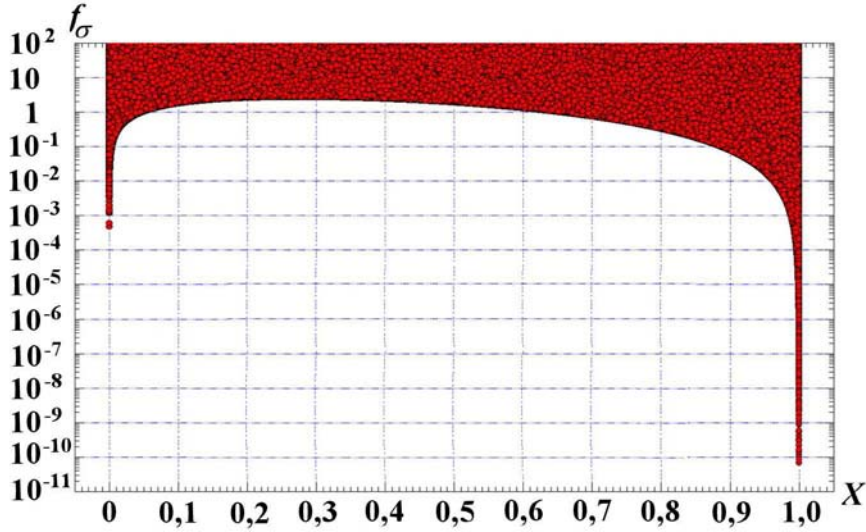


Рис. 3. Значения функции  $f_\sigma(X, Y, Z, W)$  из (90), (91) при  $\sigma = 0,7$

**Следствие.** При выполнении условий теоремы 3 наибольший шаг по времени, обеспечивающий нестрогую устойчивость разностной схемы (73), получается, если параметр  $\beta$  (коэффициент учета неявной теплопроводности в уравнении энергии первого этапа (69) или (64)) в условиях (87) и (88) взять равным

$$\beta = 1.$$

Тогда шаг по времени, достаточный для нестрогой устойчивости разностной схемы, определяется неравенством

$$2\sigma \frac{\tau \rho c_{\text{разн}}}{\Delta t} < 1, \quad c_{\text{разн}} = \sqrt{\frac{4\sigma \chi_K c_T^2 + c_S^2}{4\sigma \chi_K + 1}}. \quad (92)$$

**Доказательство.** Для максимизации  $\tau$  надо минимизировать подкоренное выражение (88)  $\frac{4\beta\sigma\chi_K c_T^2 + c_S^2}{1 + 4\beta\sigma\chi_K} = c_T^2 + \frac{c_S^2 - c_T^2}{1 + 4\beta\sigma\chi_K}$ , а для этого надо максимизировать  $1 + 4\beta\sigma\chi_K$ . Отсюда с учетом (86) получаем наилучшее значение  $\beta = 1$ , что завершает доказательство следствия.

Вычисления, аналогичные выполненным для проверки положительности (90), (91), были проведены для ряда значений  $\beta > 1$ . При этом вблизи грани  $X = 0$  нарушалось условие (П12) леммы 5 (см. Приложение). Анализ показал, что при  $\beta > 1$  для обеспечения устойчивости надо уменьшать правую часть в неравенствах (87) и (88), что в целом приводит к уменьшению допустимого шага по времени. Поэтому вариант  $\beta = 1$  дает наилучшие условия устойчивости (92).

Для сравнения разностной скорости звука из (92) с фазовой скоростью (8) дисперсионного уравнения (7) возьмем  $\tau$  из изэнтропического условия Куранта  $2\sigma \frac{\tau \rho c_S}{\Delta t} = 1$  и введем относительное тепловое число Куранта  $k$  формулой  $\chi_K = \frac{\tau Q}{\Delta t^2} = \frac{k}{2\sigma\pi}$ . Тогда из (92) имеем  $\varepsilon_{\text{разн}} = \frac{c_{\text{разн}}}{c_S} = \sqrt{\frac{2k\varepsilon_T^2 + \pi}{2k + \pi}}$ . В (7) возьмем длину волны, равную двум ячейкам сетки  $\xi = \frac{\pi}{\Delta t} = \frac{ka_S}{Q}$ .

На рис. 4 приведены зависимости относительных разностных скоростей звука  $\varepsilon_{\text{разн}}$  и относительных фазовых скоростей  $\varepsilon(k) = a(k)/a_S$  для нескольких значений  $\varepsilon_T = a_T/a_S$ , где фазовые скорости получены решением (7). Разностная скорость звука с ростом теплового числа Куранта приближается сверху к изотермической скорости звука. Надежная 10%-ная близость достигается для значений теплового числа Куранта порядка сотни.



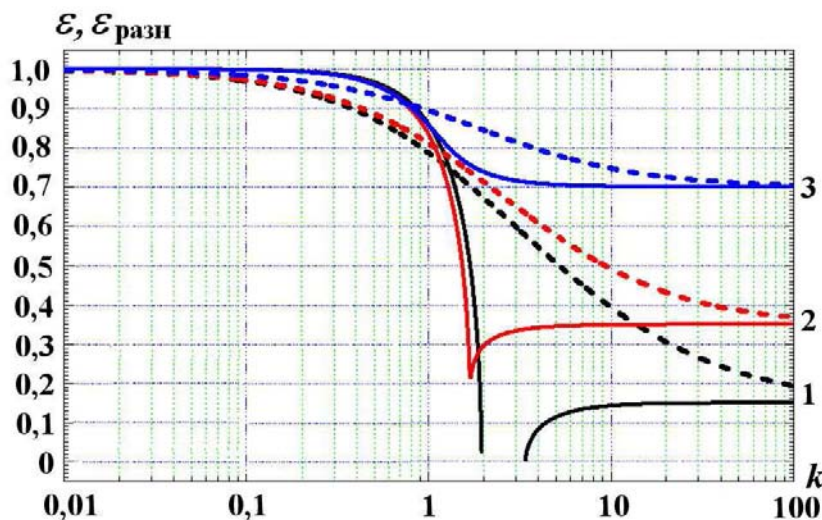


Рис. 4. Сравнение зависимостей от относительного теплового числа Куранта  $k$  относительной фазовой скорости  $\varepsilon$  (—) и относительной разностной скорости звука  $\varepsilon_{\text{разн}}$  (---) для нескольких значений  $\varepsilon_T = c_T/c_S$ : 1 —  $\varepsilon_T = 0,15$ ; 2 —  $\varepsilon_T = 0,35$ ; 3 —  $\varepsilon_T = 0,7$

### Заключение

Показано, что условия устойчивости двухэтапной разностной схемы счета газовой динамики в переменных Лагранжа зависят от способа учета неявной теплопроводности. В большинстве способов условия устойчивости типа Куранта зависят только от изэнтропической скорости звука и не зависят от наличия неявной теплопроводности.

Только в случае двукратного решения уравнений неявной теплопроводности на одном шаге по времени (в двух газодинамических уравнениях энергии) получены необходимые и достаточные условия, в которых присутствует непрерывный переход от изэнтропической скорости звука к изотермической при увеличении теплового числа Куранта, что увеличивает допустимый шаг по времени при отличии изотермической скорости звука от изэнтропической.

Представляется интересным изучить влияние разных способов учета неявной теплопроводности на устойчивость других явных разностных схем счета газовой динамики в переменных Лагранжа.

### Приложение. Вспомогательные результаты, связанные со спектральным методом исследования устойчивости

Приведем здесь с точными формулировками несколько результатов технического характера (возможно, известных), использованных в данной работе.

**Определение 1.** Разностная схема называется  $\rho$ -устойчивой с некоторой вещественной положительной постоянной  $\rho > 0$ , если все собственные значения  $\lambda$  ее оператора перехода удовлетворяют условию  $|\lambda| < \rho$ . Тогда говорим, что корни характеристического многочлена оператора перехода разностной схемы удовлетворяют условию  $\rho$ -устойчивости. При  $\rho = 1$   $\rho$ -устойчивая схема называется строго устойчивой.

В практике газодинамических разностных схем понятие строгой устойчивости не требуется. Для линейных моделей (уравнений линейной акустики) возмущения не затухают, что противоречит понятию строгой устойчивости.

**Определение 2.** Разностная схема называется нестрого устойчивой, если все собственные значения  $\lambda$  ее оператора перехода не превышают по абсолютной величине единицы:  $|\lambda| \leq 1$ . В

этом случае будем говорить, что корни характеристического многочлена оператора перехода разностной схемы удовлетворяют условию нестрогой устойчивости.

Критерий Рауса—Гурвица [10] не дает условий нестрогой устойчивости. Но с его помощью можно получить условия  $\rho$ -устойчивости для  $\rho = 1 + \varepsilon$  при всех достаточно малых положительных  $\varepsilon$  и затем сделать предельный переход  $\varepsilon \rightarrow +0$  (такого рода пример приведен в [16]). Отметим, что имеются примеры, когда простая замена в условиях строгой устойчивости строгих неравенств нестрогими дает неправильные условия нестрогой устойчивости.

**Лемма 2.** *Квадратное уравнение  $a\lambda^2 + 2b\lambda + c = 0$  с вещественными коэффициентами  $a, b$  и  $c$  и строго положительным старшим коэффициентом  $a > 0$  имеет корни  $\lambda$  только в замкнутой единичной окружности  $|\lambda| \leq 1$  тогда и только тогда, когда выполнены следующие три нестрогих неравенства:*

$$a - c \geq 0; a + 2b + c \geq 0; a - 2b + c \geq 0. \quad (\text{П1})$$

Доказательство сводится к простому анализу явных формул для вещественных или комплексных корней квадратного уравнения. Условие строгой устойчивости  $|\lambda| < 1$  в виде строгих аналогов неравенств (П1) дано в [17].

Перейдем к нестрогой устойчивости корней характеристических уравнений третьей степени с вещественными коэффициентами. Для их получения нужны условия  $\rho$ -устойчивости.

**Лемма 3.** *Пусть вещественные коэффициенты кубического уравнения*

$$b_3\lambda^3 + b_2\lambda^2 + b_1\lambda + b_0 = 0 \quad (\text{П2})$$

*удовлетворяют условию*

$$a_3 = b_3 - b_2 + b_1 - b_0 \neq 0. \quad (\text{П3})$$

*Тогда для некоторого достаточно малого положительного  $\varepsilon_0$  и любого  $\rho = 1 + \varepsilon$ ,  $|\varepsilon| \leq \varepsilon_0$ , уравнение (П2) имеет все корни  $\lambda$  строго внутри окружности  $|\lambda| < \rho$  тогда и только тогда, когда одновременно выполнены следующие три неравенства:*

$$\begin{aligned} (b_3\rho^3 - b_2\rho^2 + b_1\rho - b_0) (3b_3\rho^3 - b_2\rho^2 - b_1\rho + 3b_0) &> 0; \\ (b_3\rho^3 - b_2\rho^2 + b_1\rho - b_0) (b_3\rho^3 + b_2\rho^2 + b_1\rho + b_0) &> 0; \\ b_3\rho^4 (b_3\rho^2 - b_1) - b_0 (b_0 - b_2\rho^2) &> 0. \end{aligned} \quad (\text{П4})$$

**Доказательство.** После замены  $\lambda = \rho \frac{1+x}{1-x}$  (отображение левой полуплоскости внутрь круга) получим кубическое уравнение для  $x$  (из (П3) следует, что старший коэффициент этого уравнения ненулевой), применив к которому критерий Рауса—Гурвица [10], получим необходимые и достаточные условия  $\rho$ -устойчивости в виде набора (П4).

**Лемма 4. 1.** *Пусть вещественные коэффициенты кубического уравнения (П2) удовлетворяют условию (П3). Чтобы корни  $\lambda$  уравнения (П2) удовлетворяли условию нестрогой устойчивости  $|\lambda| \leq 1$ , необходимо одновременное выполнение трех неравенств:*

$$a_3 a_2 = (b_3 - b_2 + b_1 - b_0) (3b_3 - b_2 - b_1 + 3b_0) \geq 0; \quad (\text{П5})$$

$$a_3 a_0 = (b_3 - b_2 + b_1 - b_0) (b_3 + b_2 + b_1 + b_0) \geq 0; \quad (\text{П6})$$

$$a_1 a_2 - a_0 a_3 = 8b_3 (b_3 - b_1) - 8b_0 (b_0 - b_2) \geq 0. \quad (\text{П7})$$

2. Пусть коэффициенты кубического уравнения (П2) удовлетворяют условию

$$a_3 = b_3 - b_2 + b_1 - b_0 = 0. \quad (\text{П8})$$

Чтобы при этом корни  $\lambda$  уравнения (П2) удовлетворяли условию нестрогой устойчивости  $|\lambda| \leq 1$ , необходимо и достаточно одновременное выполнение следующих трех неравенств:

$$b_2 - b_1 \geq 0; \quad b_3 + b_1 \geq 0; \quad 3b_3 - 2b_2 + b_1 \geq 0. \quad (\text{П9})$$

**Доказательство.** Отрицательность любой из трех величин (П5)—(П7) нарушает соответствующее неравенство из набора (П4), что доказывает первую часть леммы.

Из (П8) следует, что  $\lambda = -1$  является корнем уравнения (П2). Применяя к оставшемуся квадратному уравнению лемму 2, получим условия (П9), что доказывает вторую часть леммы 4.

**Лемма 5.** Чтобы все корни  $\lambda$  уравнения  $b_3\lambda^3 + b_2\lambda^2 + b_1\lambda + b_0 = 0$  удовлетворяли условию нестрогой устойчивости  $|\lambda| \leq 1$ , достаточно одновременного выполнения трех неравенств:

$$a_3a_2 = (b_3 - b_2 + b_1 - b_0)(3b_3 - b_2 - b_1 + 3b_0) > 0; \quad (\text{П10})$$

$$a_3a_0 = (b_3 - b_2 + b_1 - b_0)(b_3 + b_2 + b_1 + b_0) > 0; \quad (\text{П11})$$

$$a_1a_2 - a_0a_3 = 8b_3(b_3 - b_1) - 8b_0(b_0 - b_2) > 0. \quad (\text{П12})$$

**Доказательство.** Если выполнены строгие неравенства (П10)—(П12), то для некоторого достаточно малого положительного  $\varepsilon_0$  соответствующие выражения в неравенствах (П4) будут строго положительны для любого  $\rho = 1 + \varepsilon$ ,  $0 < \varepsilon \leq \varepsilon_0$ . Отсюда с учетом леммы 3 получаем  $|\lambda| \leq 1$ , что завершает доказательство леммы 5.

**Лемма 6.** Многочлен  $y = ax^2 + bx + c$  с вещественными коэффициентами при  $a > 0$  и  $c > 0$  будет принимать на положительной полуоси  $x > 0$  положительные (неотрицательные) значения тогда и только тогда, когда выполнено неравенство

$$b > -2\sqrt{ac}$$

или соответственно его нестрогий аналог.

Доказательство леммы 6 основано на тождестве

$$ax^2 + bx + c = (x\sqrt{a} - \sqrt{c})^2 + x(b + 2\sqrt{ac}).$$

### Список литературы

1. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные схемы газовой динамики. М.: Наука, 1975.
2. Bondarenko Yu. A., Zmushko V. V., Stenin A. M. Local and nonlocal stability conditions of difference schemes for calculating gas-dynamics problems in Lagrangian coordinates // Numerical Methods in Fluid Dynamics / Ed. by N. N. Yanenko and Yu. I. Shokin. M.: MIR, 1984. P. 245—264.
3. Терстон Р. Распространение волн в жидкостях и в твердых телах // Физическая акустика. Т. 1, ч. А. Методы и приборы ультразвуковых исследований. М.: Мир, 1966. С. 13—139.
4. Исакович М. А. Общая акустика. М.: Физматлит, 1973.
5. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 1963.
6. Turkel E. Phase error and stability of second order methods for hyperbolic problems. I // J. Comp. Phys. 1974. Vol. 15, No 2. P. 226—250.

7. *Turkel E., Gottlieb D.* Phase error and stability of second order methods for hyperbolic problems. II // *J. Comp. Phys.* 1974. Vol. 15, No 2. P. 251–265.
8. *Шокин Ю. И.* К анализу диссипации и дисперсии разностных схем // *Числ. методы мех. спл. среды.* 1976. Т. 7, № 7. С. 131–141.
9. *Макаренко А. С., Москальков М. Н.* О дисперсии локально-одномерных схем для уравнения переноса // Там же. 1981. Т. 12, № 2. С. 64–70.
10. *Ланкастер Р.* Теория матриц. М.: Физматлит, 1982.
11. *Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.* Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М.: Гос. изд-во тех.-теор. лит-ры, 1955.
12. *Ладагин В. К., Пастушенко А. М.* Об одной схеме расчета газодинамических движений // *Числ. методы мех. спл. среды.* 1977. Т. 8, № 2. С. 66–72.
13. *Zmushko V. V.* Computation of convective flows and their realization in MIMOZA code // *Proc. of the Int. Workshop. "New Model and Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media."* Oxford, September 15–19, 1997. Oxford, 1998. Vol. 1. P. 423–430.
14. *Шумкина Е. Н., Бабанов А. В.* Решение двумерного уравнения теплопроводности в методике МИМОЗА с формированием общей системы линейных алгебраических уравнений по всей задаче // "Молодежь в науке". Сб. докл. IX науч.-тех. конф. Саров, 26–28 октября 2010 г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 159–166.
15. *Богданов А. А.* Визуализация данных в Microsoft Origin. М.: Альтекс-А, 2003.
16. *Бондаренко Ю. А.* Устойчивость пятислойных и семислойных обратимых по времени операторных разностных схем // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 1992. Вып. 3. С. 28–36.
17. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Устойчивость разностных схем. М.: Физматлит, 1973.

Статья поступила в редакцию 16.02.15.

EFFECT OF THE WAY TO ACCOUNT FOR HEAT TRANSFER ON THE CALCULATION STABILITY OF TWO-PHASE GAS-DYNAMIC DIFFERENCE SCHEME / Yu. A. Bondarenko (FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov, Nizhny Novgorod region).

The two-phase difference gas-dynamic scheme with Lagrangian variables is studied with account for heat transfer. We obtained that the conditions for the Courant-type time-step strongly depend on the way the implicit heat conductivity is used in the difference scheme. In major cases the condition of stability is determined by the isentropic speed of sound. We offer a modification with account for the implicit heat conductivity in two energy equations. Continuous transition from the isentropic speed of sound to the isothermal one at the Courant thermal number increase is present in the conditions of the modified scheme stability.

*Keywords:* gas dynamics with thermal conductivity, difference schemes, splitting in terms of physical processes, difference scheme stability, isentropic speed of sound, isothermal speed of sound, thermal sound dispersion.

---

УДК 519.6

## ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ АЛГОРИТМА SIMPLE ДЛЯ РАСЧЕТА СЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЙ

Н. В. Тарасова, А. С. Козелков, Д. П. Мелешкина,  
С. В. Лашкин, О. В. Денисова, М. А. Сизова  
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Данная работа посвящена описанию модификации алгоритма SIMPLE для случая сжимаемых течений и исследованию применимости реализованного алгоритма для расчета трансзвуковых сжимаемых течений в рамках пакета программ ЛОГОС. На примере задач обтекания крылового профиля и течения внутри диффузора демонстрируются возможности реализованного алгоритма по достижению приемлемой точности и скорости сходимости при использовании различных схем дискретизации конвективного слагаемого и изменении других счетных параметров. Полученные результаты сравниваются с данными известных экспериментальных тестов.

*Ключевые слова:* алгоритм SIMPLE, сжимаемые трансзвуковые течения, схемы дискретизации конвективного слагаемого, пакет программ ЛОГОС.

### Введение

Проблема построения универсального алгоритма для численного решения системы уравнений Навье—Стокса, пригодного для расчета течений при произвольных значениях числа Маха, хорошо известна. Для решения этой проблемы было предложено несколько подходов, которые можно условно разделить на две группы. К первой группе относятся методы, изначально сконструированные для расчета сжимаемых течений и основанные на решении полной системы уравнений Навье—Стокса [1–4]. Эти методы позволяют рассчитывать как дозвуковые, так и сверхзвуковые течения, однако при их использовании возникает проблема численного моделирования течений при значениях числа Маха, близких к нулю, которая решается с помощью специальных подходов. Ко второй группе относятся методы, предназначенные для решения несжимаемых течений, основанные на решении системы уравнений Навье—Стокса с расщеплением по физическим процессам и обобщенные на сжимаемый случай [5, 6].

Численное решение полной системы уравнений Навье—Стокса без расщепления при значениях числа Маха, существенно меньших единицы, сопряжено с серьезными трудностями, связанными со значительно различающимися временами конвективного переноса и распространения акустических возмущений, а также с малыми изменениями относительного давления. В этом случае ввиду жесткости системы при использовании классических методов решения полной системы уравнений Навье—Стокса резко ухудшаются свойства их сходимости и устойчивости, а некоторые методы вообще становятся непригодными. Более того, здесь практически становится невозможным использование явных схем расчета в силу неприемлемо жесткого ограничения на шаг по времени. Для решения проблемы численного моделирования *гипозвуковых* течений (число Маха много меньше единицы) на основе уравнений динамики сжимаемого газа был предложен подход, основанный на модификации коэффициентов, отвечающих за производную по времени, методом искусственной сжимаемости [3, 4]. К недостаткам метода искусственной сжимаемости можно отнести, в частности, его существенно итерационную формулировку: даже при использовании явной схемы на каждом шаге по физическому времени требуются итерации (установление по псевдовремени) для сведения баланса

массы. Выбор коэффициента искусственной сжимаемости также является нетривиальной задачей, поскольку на него накладываются определенные ограничения как сверху, так и снизу.

Методы второй группы изначально ориентированы на расчет несжимаемых течений [5, 6], в которых для нахождения поля давления, обеспечивающего выполнение уравнения непрерывности, решается специальным образом "сконструированное" уравнение Пуассона. Одним из таких методов, широко применяемых на практике, является метод SIMPLE [5]. Метод SIMPLE несложно обобщить на случай расчета сжимаемых течений [6], модифицировав имеющееся уравнение Пуассона. Модификация состоит в добавлении в уравнение Пуассона конвективного члена и дополнительного нестационарного слагаемого, возникающего из-за необходимости коррекции плотности для удовлетворения уравнения непрерывности. Таким образом, при малых значениях числа Маха преобладающее влияние оказывает диффузионный член и получается фактически исходное уравнение Пуассона. При больших значениях числа Маха преобладает конвективный член, отражающий гиперболическую природу течения. Данный метод автоматически учитывает локальную природу течения и может применяться ко всей области течения. Методы второй группы, очевидно, более экономичны по сравнению с методами первой группы, и их точность в большинстве случаев достаточна для расчета дозвуковых и транзвуковых течений.

Несмотря на активное использование метода SIMPLE на практике, широкого исследования применимости этого метода для задач с различными значениями числа Маха, по крайней мере в русскоязычной литературе, не существует, а англоязычная ограничивается отдельными комментариями по применению той или иной модификации метода для решения конкретных задач.

В данной работе представлено исследование применимости метода SIMPLE для расчета транзвуковых течений. Рассмотрены задачи моделирования внутренних течений, а также задачи внешнего обтекания, путем расчета которых определяются основные аэродинамические характеристики тел различной конфигурации. На основе анализа результатов расчетов сделан вывод о необходимости использования модификации SIMPLEC [6] с целью увеличения скорости сходимости алгоритма в условиях ощутимого изменения плотности при достаточно больших значениях числа Маха. Кроме того, приведены оптимальные значения коэффициентов релаксации. Произведен сравнительный анализ использования различных схем дискретизации конвективных потоков в рамках данного алгоритма применительно к расчету сжимаемых течений.

### Обобщение алгоритма SIMPLE на случай сжимаемых течений

Для описания несжимаемых течений используется следующая система уравнений Навье—Стокса:

$$\begin{aligned} \nabla \vec{u} &= 0; \\ \frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla (\rho \vec{u} \vec{u}) &= -\nabla p + \nabla (\tau_\mu + \tau_t). \end{aligned}$$

Основная идея SIMPLE-подобных алгоритмов заключается в том, что неявная связь давления и скорости, имеющаяся при описании несжимаемых течений, учитывается с помощью применения некоторой итерационной процедуры решения. На первом этапе алгоритма (шаг предиктора) из уравнения сохранения импульса с использованием градиента давления с предыдущей итерации вычисляется предварительное поле скорости, которое пока не удовлетворяет уравнению непрерывности. В дискретной форме в общем виде уравнение выглядит следующим образом:

$$A_P^{u_i} u_{i,P}^{m*} + \sum_l A_l^{u_i} u_{i,l}^{m*} = Q_{u_i}^{m-1} - \left( \frac{\delta p^{m-1}}{\delta x_i} \right)_P. \quad (1)$$

Здесь  $P$  — индекс некоторого контрольного объема, а  $l$  — индексы контрольных объемов, соседних с данным;  $m$  — номер итерации;  $u_i^{m*}$  — компонента предварительного поля скоростей;  $p$  — давление;  $A_P^{u_i}$  — полученные коэффициенты линейного уравнения;  $Q_{u_i}^{m-1}$  — источниковые члены (правая часть);  $\frac{\delta}{\delta x}$  обозначает дискретизированную пространственную производную в общем виде (дискретизация может быть разной).

На следующем этапе данное поле скорости корректируется за счет корректировки поля давления (шаг корректора) таким образом, чтобы одновременно выполнялись закон сохранения импульса и закон сохранения массы:

$$p^m = p^{m-1} + p'; \quad u^m = u^{m*} + u'. \quad (2)$$

Подставив соотношения (2) в дискретизированное уравнение моментов и приняв во внимание уравнение (1), получим

$$u'_{i,P} = \tilde{u}'_{i,P} - \frac{1}{A_P^{u_i}} \left( \frac{\delta p'}{\delta x_i} \right)_P, \quad \tilde{u}'_{i,P} = - \frac{\sum_l A_l^{u_i} u'_{i,l}}{A_P^{u_i}}. \quad (3)$$

Членом  $\tilde{u}'_{i,P}$  пренебрегают. При подстановке (2) в уравнение непрерывности получается выражение

$$- \left[ \frac{\delta (\rho u'_i)}{\delta x_i} \right]_P = \left[ \frac{\delta (\rho u_i^{m*})}{\delta x_i} \right]_P,$$

или после интегрирования по объему в случае применения конечно-объемной дискретизации

$$\sum_f F_f^* + \sum_f \rho_f (\tilde{u}'_n)_f \vec{S}_f = 0,$$

где  $F_f^* = \rho_f (\tilde{u}_n^{m*})_f \vec{S}_f$  — поток массы через грань  $f$  с направляющим вектором  $\vec{S}_f$ ;  $\rho_f$  — плотность потока через грань  $f$ .

При использовании выражения (3) для коррекции скорости получается уравнение Пуассона для вычисления коррекции давления:

$$\frac{\delta}{\delta x_i} \left[ \frac{\rho}{A_P^{u_i}} \left( \frac{\delta p'}{\delta x_i} \right) \right]_P = \left[ \frac{\delta (\rho u_i^{m*})}{\delta x_i} \right]_P. \quad (4)$$

Шаги предиктора и корректора повторяются итерационно до момента достижения приемлемой точности для выполнения законов сохранения.

Этот метод можно обобщить на случай сжимаемых течений [6]. В общих чертах модификация метода состоит в том, что после стандартного первого шага алгоритма SIMPLE (шага предиктора) и получения предварительного поля скорости  $\vec{u}^{m*}$  ( $m^*$  — номер промежуточной итерации) необходимо скорректировать не только скорость, но и плотность таким образом, чтобы удовлетворялось уравнение непрерывности. В этом случае при применении конечно-объемной дискретизации поток массы корректируется [2, 6]:

$$F_f = (\rho^{m-1} + \rho')_f (\vec{u}^{m*} + \vec{u}')_f \vec{S}_f, \\ \text{или } F_f = F_f^{m*} + (\rho' \vec{u}^{m*} \vec{S})_f + (\rho^{m-1} \vec{u}' \vec{S})_f + (\rho' \vec{u}' \vec{S})_f. \quad (5)$$

Последним членом в (5), как правило, пренебрегают, так как он имеет второй порядок малости.

Третий член в правой части (5), характеризующий коррекцию скорости, выражается, как и для случая несжимаемых течений, через градиент приращения давления  $p'$ :

$$(\rho^{m-1} S u'_n)_f = -A_f \left( \frac{\delta p'}{\delta n} \right)_f.$$

Здесь  $S$  — модуль направляющего вектора грани, равный площади грани;  $n$  — индекс, обозначающий нормальную составляющую вектора;  $A_f$  — коэффициент пропорциональности, определенный на грани и зависящий от дискретизации уравнения сохранения импульсов;  $\frac{\delta}{\delta n}$  — нормальная составляющая градиента.

Второй член в правой части уравнения (5), отвечающий за коррекцию плотности и появившийся благодаря сжимаемости, также выражается через приращение давления, если использовать связь плотности и давления из уравнения состояния в адиабатическом приближении:

$$\left(\rho' u_n^{m*} S\right)_f = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_f B_f p'_f.$$

Здесь  $B_f$  — некоторый коэффициент, отражающий общую зависимость.

Тогда уравнение непрерывности со скорректированными потоками и плотностью в дискретном объеме будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{(\rho^{m-1} - \rho^\nu) \Delta V}{\Delta t} + \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\Delta V}{\Delta t} p' + \sum_f \left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_f B_f p'_f - \sum_f A_f \left(\frac{\delta p'}{\delta n}\right)_f + \sum_f F_f^{m*} = 0. \quad (6)$$

Здесь верхний индекс  $\nu$  — номер предыдущего момента времени;  $\Delta V$  — объем ячейки;  $\Delta t$  — шаг по времени.

Уравнение (6) для сжимаемых течений отличается от аналогичного уравнения относительно приращения давления для несжимаемых течений главным образом тем, что оно по сути своей гиперболическое и присутствие конвективного члена делает его решение единственным. Это, в свою очередь, отражается на задании граничных условий и трактовке роли давления во всей системе. Расчет энергии также оказывает влияние на всю систему в целом.

Опыт проведения расчетов течений со значениями числа Маха порядка единицы с использованием данной модификации метода SIMPLE показал, что необходимо выбирать достаточно малые коэффициенты релаксации для получения устойчивого решения. Однако это приводит к медленной скорости сходимости при вычислении поля давления. Для исправления данного недостатка предложено несколько уточненных вариантов алгоритма SIMPLE [6]. Наиболее предпочтительным из них по соотношению скорости сходимости и численных затрат является метод SIMPLEC [6].

Эта разновидность метода SIMPLE менее груба при оценке приращения скорости на шаге корректора. В алгоритме SIMPLE при получении уравнения Пуассона относительно приращения давления использовалось допущение: пренебрегали членом  $\left[\frac{\delta(\rho \tilde{u}'_i)}{\delta x_i}\right]_P$  ( $i$  — индекс координатных осей, по повторяющимся индексам выполняется суммирование), потому что  $\tilde{u}'_P = -\sum_l A_l^u \tilde{u}'_l / A_P^u$  (здесь  $A_l^u$  — недиагональные элементы матрицы линейных уравнений относительно скорости на этапе предиктора;  $A_P^u$  — диагональный член) неизвестно на данном этапе счета. Будет более точно, если использовать некоторое приближение этого члена. Например, приращение скорости в каждом контрольном объеме можно записать как средневзвешенное приращения скоростей из соседних контрольных объемов:

$$\tilde{u}'_P = -\frac{\sum_l A_l^u \tilde{u}'_l}{\sum_l A_l^u} \implies \tilde{u}'_P = -\tilde{u}'_P \frac{\sum_l A_l^u}{A_P^u}.$$

При использовании данного выражения для  $\tilde{u}'_P$  уравнение (4) изменится в части коэффициента при градиенте приращения давления:

$$\frac{\delta}{\delta x_i} \left[ \frac{\rho}{A_P^{u_i}} \left( \frac{\delta p'}{\delta x_i} \right) \right]_P \mapsto \frac{\delta}{\delta x_i} \left[ \frac{\rho}{A_P^{u_i} + \sum_l A_l^{u_i}} \left( \frac{\delta p'}{\delta x_i} \right) \right]_P.$$

Заметим, что  $A_P^{u_i} \neq -\sum_l A_l^{u_i}$ , потому что к матрице коэффициентов системы линейных уравнений относительно скоростей на данный момент уже была применена релаксация с коэффициентом  $\alpha_u$ .

Указанные изменения можно расценивать как некоторую дополнительную релаксацию матрицы давления с коэффициентом релаксации  $\alpha_p = 1 - \alpha_u$ . Это улучшает обусловленность матрицы и ускоряет сходимость.



Для ускорения сходимости и повышения точности численного решения при трансзвуковых сжимаемых течениях необходимо тщательно подходить к выбору схемы дискретизации конвективных потоков [7]. Существующие схемы отличаются способом реконструкции значения искомой величины на грань и, следовательно, имеют разные диссипативные свойства. Схемы первого порядка сохраняют ограниченность (отсутствие сильных осцилляций) решения, но являются более диссипативными, что зачастую приводит к чрезмерному размыванию фронта ударной волны. Схемы второго порядка точности имеют меньшую диссипативную ошибку, но могут порождать нефизичные осцилляции [7]. Исследование диссипативных свойств различных схем дискретизации для расчета гидродинамических турбулентных течений, включая вихреразрешающие подходы, можно найти, например, в [8, 9]. В данной работе для исследования будем использовать классические схемы дискретизации: противопоточную, центрально-разностного дифференцирования и гибридную.

При применении центрально-разностных и гибридных схем возможно возникновение сильных осцилляций, приводящих к развитию неустойчивости и, как следствие, к расходимости итерационного процесса, особенно на начальном этапе расчетов в условиях отсутствия устойчивого решения. Одним из способов подавления осцилляций является введение схем типа TVD [10], в которых используются ограничители градиентов. Такой подход представляет собой способ уменьшения порядка точности схемы до первого в областях разрывов решения. Однако в результате решение может получиться недостаточно точным и обладать большой численной диффузией в данных областях. Альтернативой в таком случае является использование ограничителей лишь в начале итерационного процесса. При выполнении некоторого критерия (например устойчивого падения невязки решения), обозначающего достижение некоторого устойчивого состояния итерационного процесса, необходимо перейти на схему второго порядка точности уже без ограничителей. Данная стратегия оказалась успешной и была опробована на серии тестовых задач. В настоящей работе использовался ограничитель из [11] (Venkatarishnan).

Исключить осцилляции можно также, применяя на начальном этапе расчета противопоточную схему первого порядка точности с последующим переключением на схему второго порядка точности при достижении того же самого критерия.

## Численные эксперименты

В настоящей работе все расчеты проводились в рамках пакета программ ЛОГОС — российского программного продукта инженерного анализа, предназначенного для решения сопряженных трехмерных задач конвективного теплопереноса, аэродинамики и гидродинамики на *параллельных* ЭВМ [12, 13]. В этом разделе рассматриваются некоторые известные задачи, для которых имеются достоверные экспериментальные данные и которые используются для калибровки численных методов ведущими коллективами, разрабатывающими численные методы и программное обеспечение.

**Задача 1. Расчет аэродинамических характеристик крылового профиля RAЕ 2822.** Рассматриваемый крыловой профиль [14] изображен на рис. 1.

В представленной модели используются блочно-структурированные сетки. Каждая расчетная сетка имеет сгущение в области образования скачка уплотнения потока. Вблизи твердых стенок построены призматические слои с коэффициентом роста не более 1,12. Толщина первой расчетной ячейки во всех сетках обеспечивает значение безразмерного расстояния до стенки  $y^+ < 1$ . Расчетная область представляет собой прямоугольный параллелепипед, размеры которого в двух направлениях ( $x, y$ ) определяются из условия обеспечения расстояния в 20 характерных длин (корневых хорд) от модели до границы расчетной области, а в направлении третьей координаты  $z$  он имеет толщину, равную 0,1 м. Для численного исследования использовались три последовательно сгущающиеся расчетные сетки с числом ячеек  $N = 52\,000; 666\,746; 791\,226$  и характерным размером ячейки в основной области скачка  $d = 0,03; 0,012; 0,0008$  м соответственно.

В расчетах рассматривались три режима с разными значениями числа Маха (табл. 1). Все расчеты выполнялись с коэффициентом релаксации  $\alpha_u = 0,95; \alpha_p = 0,001$ .

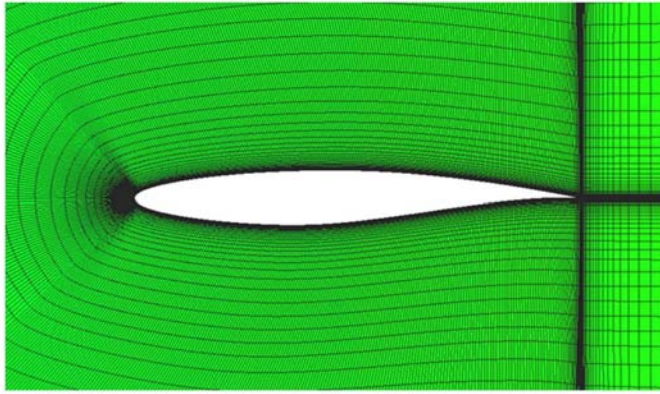


Рис. 1. Общий вид расчетной сетки задачи 1

Таблица 1

Режимы расчета задачи 1

Номер	Число Маха M	Угол атаки $\alpha, ^\circ$	Число Рейнольдса Re	Плотность $\rho_\infty, \text{кг/м}^3$	Давление $p_\infty, \text{Па}$	Молекулярная вязкость $\mu_\infty, \text{Па/с}$
1	0,725	2,92	$6,5 \cdot 10^6$	1,26	92 810	$4,5 \cdot 10^{-5}$
2	0,75	3,19	$6,2 \cdot 10^6$	1,16	84 970	$4,49 \cdot 10^{-5}$
3	0,729	2,31	$6,5 \cdot 10^6$	1,48	108 987,8	$5,34 \cdot 10^{-5}$

Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными проводилось для распределения коэффициента давления  $C_p$  и для интегральных характеристик — коэффициентов подъемной силы  $C_y$  и лобового сопротивления  $C_x$ .

Рассматривалось влияние расчетной сетки, модели турбулентности, схем дискретизации конвективного потока и ограничителей на конечный результат. Такие исследования проводились для одного режима — при  $M = 0,729$ . Результаты расчетов по распределению коэффициента давления приведены на рис. 2—4 (см. также цветную вкладку).

Характерной особенностью данного течения является отрыв потока за скачком уплотнения, замыкающим трансзвуковую зону, которая формируется на верхней поверхности профиля. Из рис. 2—4 видно, что скачок находится несколько выше по потоку и является менее интенсивным, чем в эксперименте.

На рис. 2 (см. также цветную вкладку) представлены результаты расчетов на сходимость на последовательности сгущающихся сеток. Расчеты проводились с  $(k-\omega)$ -моделью турбулентности (SST) [15] с применением CD-схемы дискретизации. Видно, что путем измельчения сетки в основной области, где происходит сильное изменение давления, была достигнута сеточная сходимость на двух более подробных сетках. Для дальнейших вычислений использовалась сетка с количеством ячеек 791 226 ( $d = 0,0008 \text{ м}$ ).

На рис. 3 (см. также цветную вкладку) представлены результаты расчетов по двум моделям турбулентности: Спаларта—Аллмараса (SA) [16] и  $(k-\omega)$ -модели Ментера (SST) (схема дискретизации CD).

На рис. 4 (см. также цветную вкладку) представлены результаты расчетов с применением различных схем дискретизации конвективного потока с ограничителями и без них, где UD — противопоточная схема первого порядка точности; CD — центрально-разностная схема второго порядка точности; QUICK — гибридная схема, сочетающая в себе схему UD совместно с градиентной поправкой и схему CD. Расчеты проводились с использованием  $(k-\omega)$ -модели турбулентности.

Видно, что точности противопоточной схемы и схем с ограничителями недостаточно для получения результата, приемлемо близкого к экспериментальным данным.

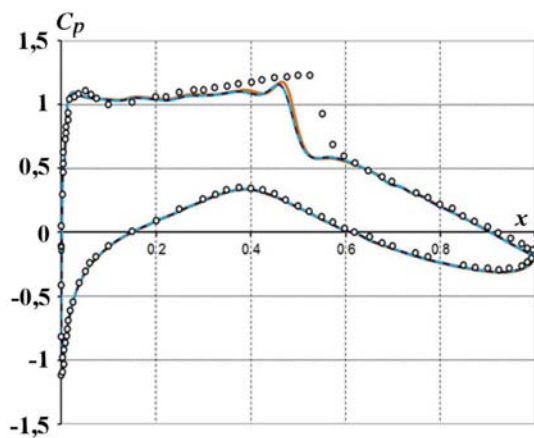


Рис. 2. Задача 1. Распределение коэффициента давления для режима с  $M = 0,729$  в расчетах на сеточную сходимость: —  $d = 0,03$  м; —  $d = 0,012$  м; - - -  $d = 0,0008$  м;  $\circ$  — эксперимент

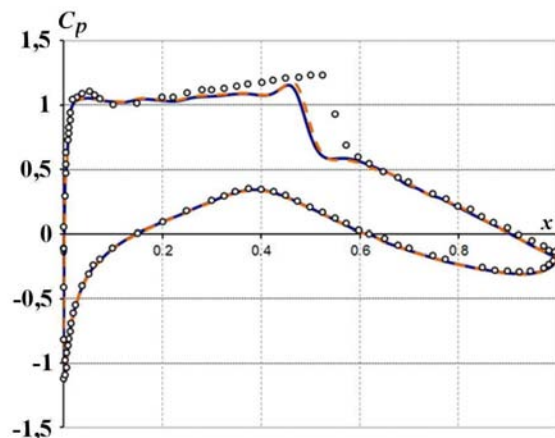


Рис. 3. Задача 1. Распределение коэффициента давления для режима с  $M = 0,729$  в расчетах с разными моделями турбулентности: — SST; - - - SA;  $\circ$  — эксперимент

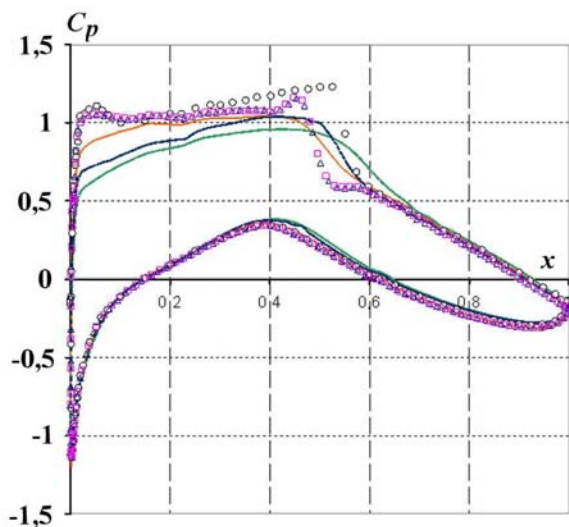


Рис. 4. Задача 1. Распределение коэффициента давления для режима с  $M = 0,729$  в расчетах с разными дифференциальными схемами: — UD; — UD с ограничителями;  $\Delta$  — CD; — CD с ограничителями;  $\square$  — QUICK;  $\circ$  — эксперимент

Из представленных данных видно, что основное несовпадение полученных результатов наблюдается на верхней кромке крыла в области формирования прямого скачка уплотнения, где существенно преобладают разномасштабные значения давления и плотности. С ростом числа Маха точность описания скачка уплотнения падает, максимальная погрешность интегральных характеристик достигает 19% по  $C_x$  и 9,6% по  $C_y$ , что ограничивает использование методики определенным спектром значений числа Маха.

Проводилась серия расчетов с увеличением преобладания схем второго порядка точности при дискретизации, т. е. с увеличением коэффициента смешения ( $\gamma = 0,5; 0,7; 1$ ). По мере увеличения коэффициента смешения наблюдается приближение численных результатов к экспериментальным. Ввиду идентичности результатов на рис. 4 приводятся результаты с максимальным коэффициентом смешения ( $\gamma = 1$ ).

Разные схемы второго порядка точности дают практически одинаковый результат, однако все они плохо описывают скачок уплотнения на верхней кромке крылового профиля, что в итоге влияет на точность определения интегральных характеристик.

На рис. 5 приводятся графики распределения коэффициента давления  $C_p$  для режимов 1 и 2 ( $M = 0,725$  и  $M = 0,75$ ) с использованием ( $k-\omega$ )-модели турбулентности.

В табл. 2 приведены значения интегральных характеристик — коэффициентов подъемной силы  $C_y$  и лобового сопротивления  $C_x$  — для этих режимов расчета в сравнении с экспериментом [14].

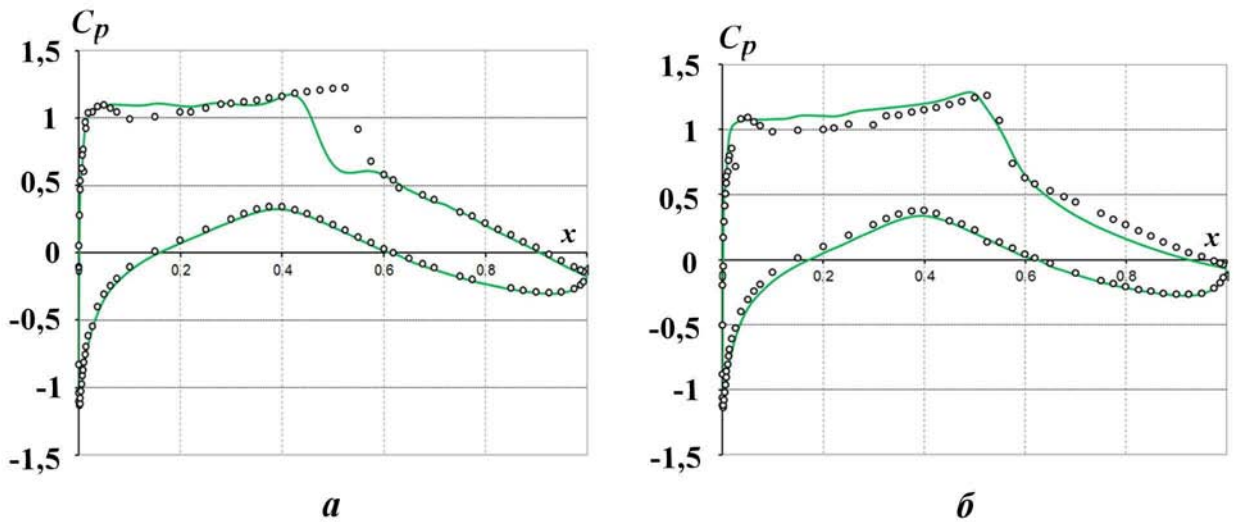


Рис. 5. Задача 1. Распределение давления  $C_p$ : а — режим 1; б — режим 2; — — расчет; о — эксперимент

Таблица 2

Задача 1. Коэффициенты подъемной силы  $C_y$  и лобового сопротивления  $C_x$

Режим	Источник данных	Сетка, $d$	$C_y$	$\Delta C_y, \%$	$C_x$	$\Delta C_x, \%$
1 ( $M = 0,725$ )	Расчет	0,03	0,77	-3,6 %	0,0139	-9,6 %
	—"	0,012	0,76	-2,9 %	0,0137	-8,6 %
	—"	0,0008	0,76	-2,9 %	0,0136	-7,2 %
	Эксперимент	—	0,743	—	0,0127	—
2 ( $M = 0,75$ )	Расчет	0,03	0,69	7,1 %	0,0288	-19,3 %
	—"	0,012	0,7	5,8 %	0,0287	-18,6 %
	—"	0,0008	0,7	5,8 %	0,0287	-18,6 %
	Эксперимент	—	0,743	—	0,0242	—

**Задача 2. Расчет аэродинамических характеристик крыла ONERA M6.** Рассматривается тестовое крыло самолета [17] (рис. 6).

Для расчета аэродинамических характеристик представленной модели используется блочно-структурированная сетка, состоящая из 2 млн ячеек. Расчетная область представляет собой прямоугольный параллелепипед, размеры которого определяются из условия обеспечения расстояния в 20 характерных длин (корневых хорд) от модели до границы расчетной области. Для моделирования обтекания крыла взяты параметры сжимаемого газа (воздуха) при следующих условиях:  $p_\infty = 30\,000$  Па;  $\rho_\infty = 0,348$  кг/м<sup>3</sup>;  $T_\infty = 300$  К. В расчетах рассматривались четыре режима обтекания со значениями числа Маха от 0,699 до 0,919 (табл. 3). Расчеты выполнялись с коэффициентом релаксации  $\alpha_u = 0,95$ ;  $\alpha_p = 0,001$ .

Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [17] проводится по распределению коэффициента давления  $C_p$  для всех режимов. Значения  $C_p$  определяются в следующих сечениях крыла:  $z = 0,239$ ;  $z = 1,077$ ;  $z = 1,184$  (рис. 7).

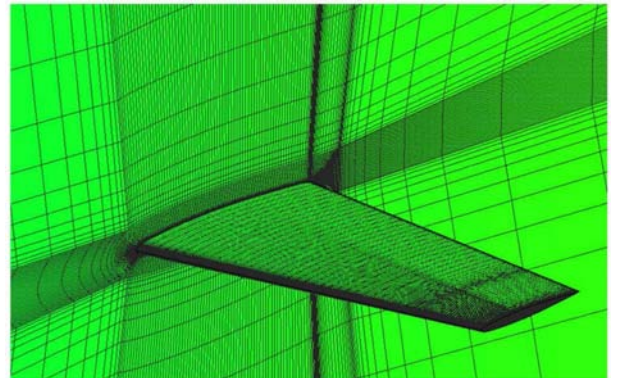


Рис. 6. Общий вид расчетной сетки задачи 2

Таблица 3

Режимы расчета задачи 2

Режим	М	$\alpha, ^\circ$	$\mu_\infty, \text{Па/с}$
1	0,699	3,06	$4,65342 \cdot 10^{-6}$
2	0,8399	0,04	$5,6 \cdot 10^{-6}$
3	0,8395	3,06	$5,6 \cdot 10^{-6}$
4	0,9190	3,07	$6,1 \cdot 10^{-6}$

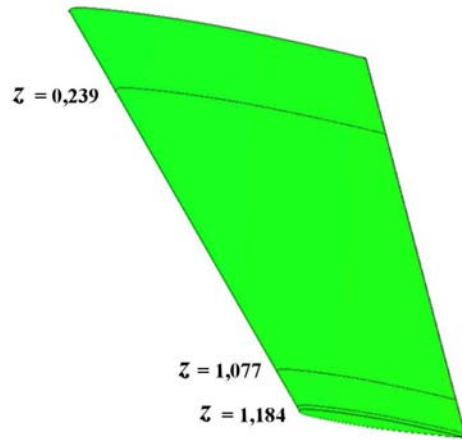


Рис. 7. Задача 2. Сечения крыла для определения  $C_p$

На рис. 8–11 представлены распределения коэффициента давления  $C_p$  в сечениях крыла для всех режимов, полученные с использованием ( $k-\omega$ )-модели турбулентности ( $c$  — нормировочный коэффициент, равный диапазону изменения координаты  $x$  в каждом сечении). Для режима 3 (рис. 10, см. также цветную вкладку) распределения коэффициента давления  $C_p$  приводятся с использованием ( $k-\omega$ )-модели и модели Спаларта—Аллмараса.

Как видно из рис. 8–11, с ростом числа Маха и угла атаки согласие полученных данных с экспериментальными значениями ухудшается, особенно это проявляется в сечении, расположенном ближе к краю крыла. Это связано с возникновением срывающихся вихрей, на точность описания которых изменение давления и плотности влияет еще заметнее.

Так, на рис. 8, 10 и 11 представлены результаты расчетов с одинаковым углом атаки, но с различными значениями числа Маха. Точность описания скачка уплотнения в сечениях  $z = 1,077$  и  $z = 1,184$  см (на рисунках *б* и *в*) по мере роста числа Маха ухудшается. Как и в задаче 1, имеется тенденция к формированию скачка уплотнения несколько выше по потоку, чем следует. При  $M = 0,919$  (см. рис. 11) результаты уже нельзя считать удовлетворительными.

На рис. 9, 10 представлены расчеты с числом Маха  $M = 0,83$  с разными углами атаки. Очевидно, что при меньших углах атаки результаты лучше согласуются с экспериментальными данными. Это связано с интенсивностью скачка уплотнения, которая при меньших углах атаки менее выражена и лучше поддается описанию в связи с меньшими разрывами в поле давления.

Таким образом, при проведении расчетов с использованием описанной методики следует ограничиваться допустимым диапазоном исследуемых параметров. Для точного определения этого диапазона необходимы дополнительные исследования в рамках каждого класса задач. Для данной задачи приемлемые результаты получаются при рассмотрении режимов со значениями числа Маха до 0,85 с углами атаки при этом до  $\alpha = 3^\circ$ . При угле атаки  $\alpha = 0 \div 1^\circ$  возможно рассмотрение течения с числом Маха до  $M = 0,9$ .

**Задача 3. Расчет внутреннего течения в трансзвуковом диффузоре.** Применимость алгоритма SIMPLE для моделирования внутренних течений рассмотрим на задаче течения вязкого сжимаемого газа в двумерном трансзвуковом диффузоре. Для данного течения имеются экспериментальные данные по распределению статического давления на верхней стенке диффузора [18].

Для расчета аэродинамических характеристик представленной модели используется блочно-структурированная сетка, состоящая из 70 тыс. ячеек. Расчетная область представлена на рис. 12 (см. также цветную вкладку).

Для моделирования течения в диффузоре взяты параметры сжимаемого газа (воздуха) при условиях, представленных в табл. 4. Проведены расчеты двух режимов обтекания с начальным числом Маха, равным 0,5. Расчеты выполнялись с коэффициентом релаксации  $\alpha_u = 0,95$ ;  $\alpha_p = 0,001$ .

Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [18] проводится для распределения коэффициента давления  $C_p$  на верхней стенке диффузора.

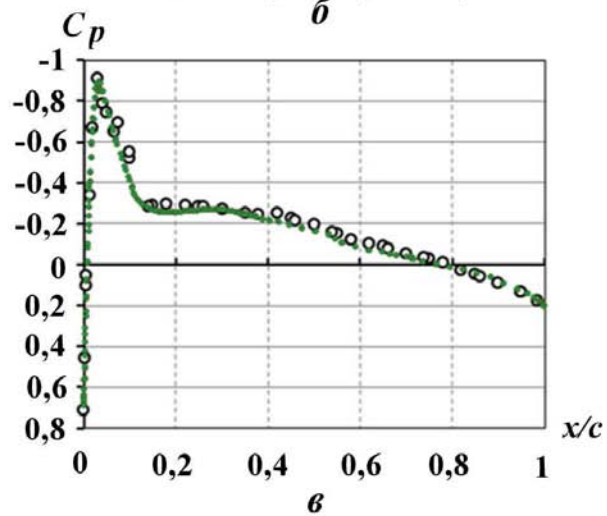
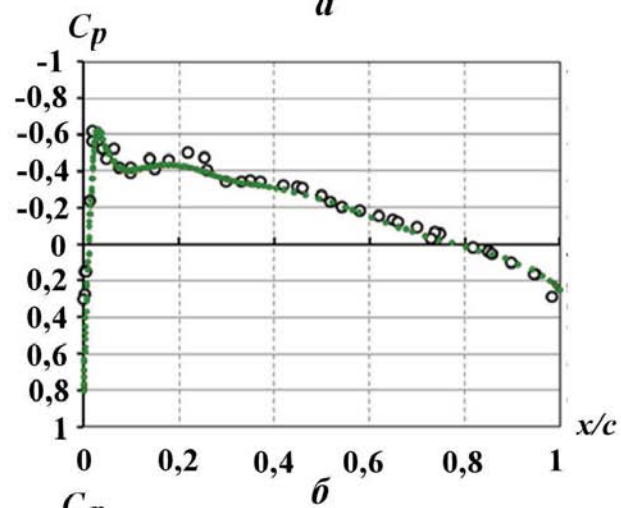
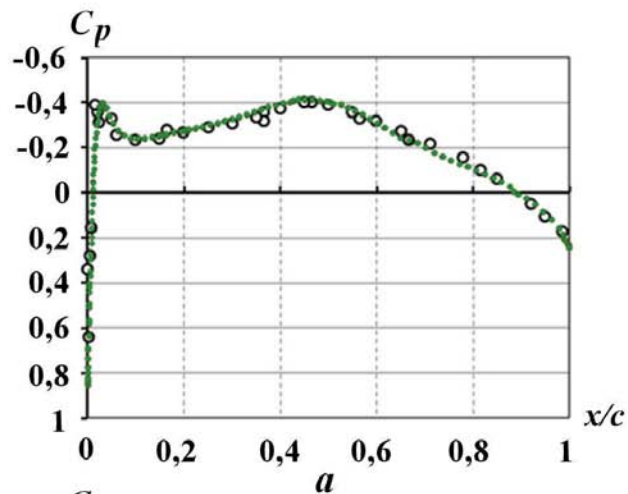
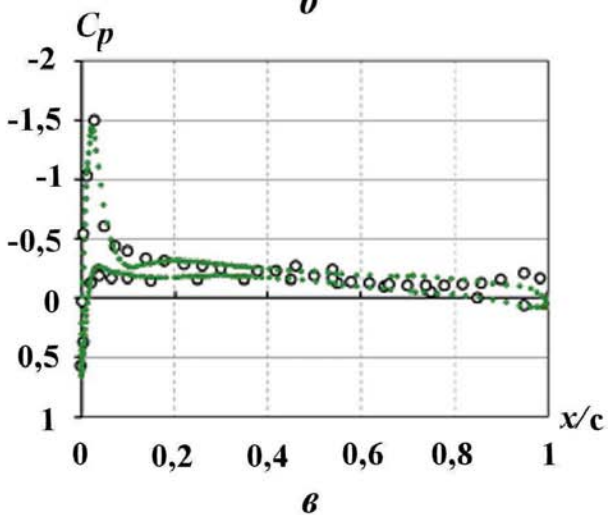
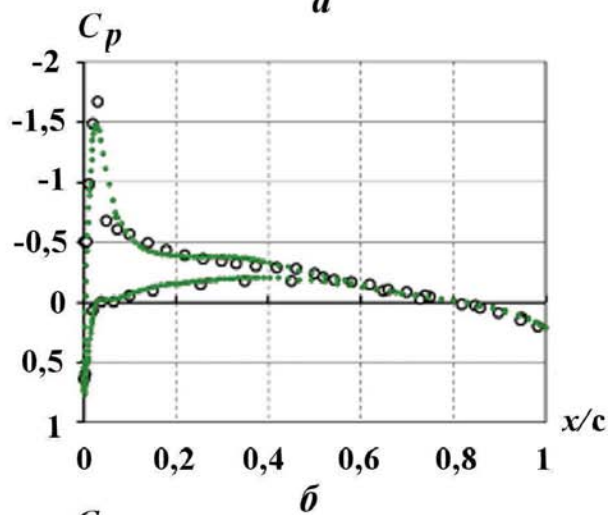
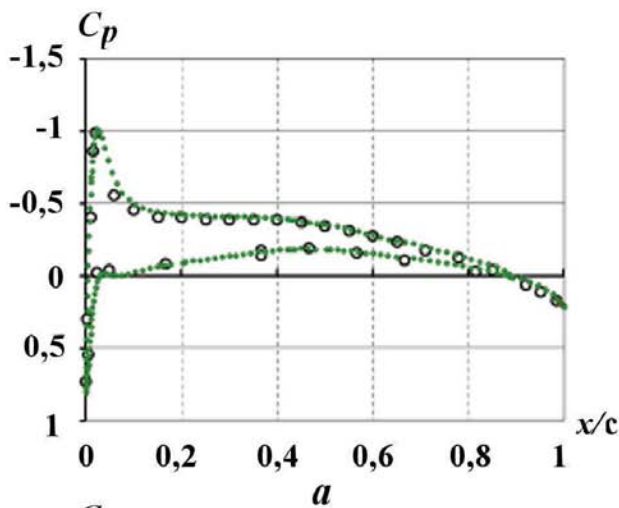


Рис. 8. Задача 2. Распределения  $C_p$  в сечениях для режима 1:  $a - z = 0,239$ ;  $b - z = 1,077$ ;  $v - z = 1,184$ ;  $\bullet$  – расчет ЛОГОС;  $\circ$  – эксперимент

Рис. 9. Задача 2. Распределения  $C_p$  в сечениях для режима 2:  $a - z = 0,239$ ;  $b - z = 1,077$ ;  $v - z = 1,184$ ;  $\bullet$  – расчет ЛОГОС;  $\circ$  – эксперимент

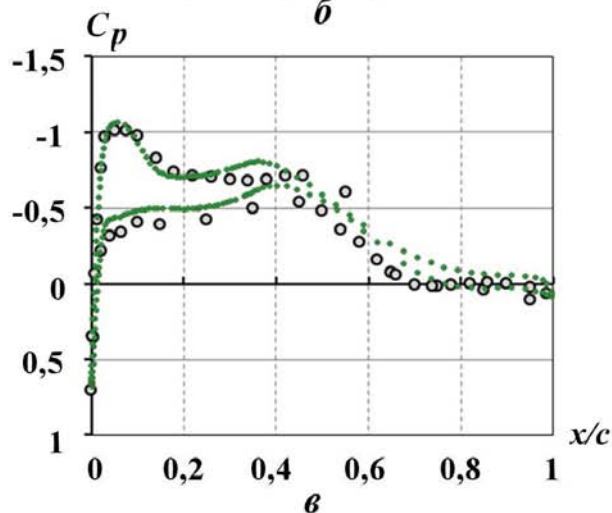
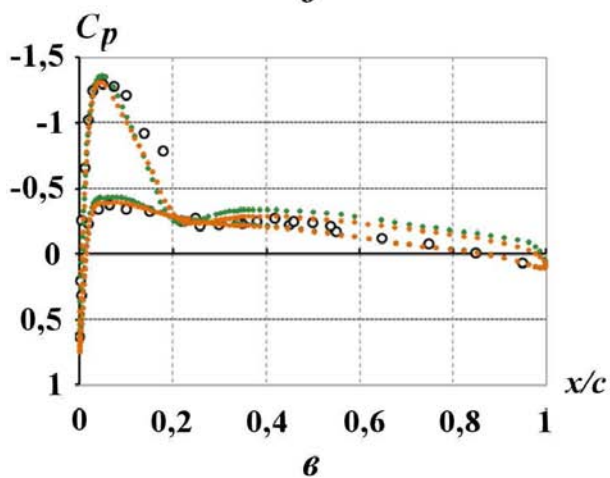
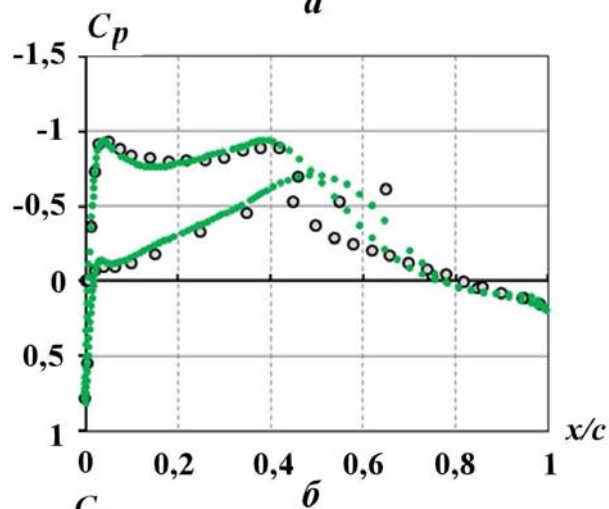
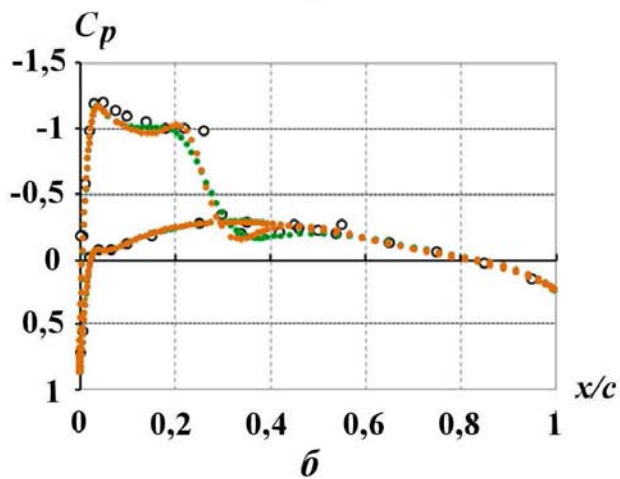
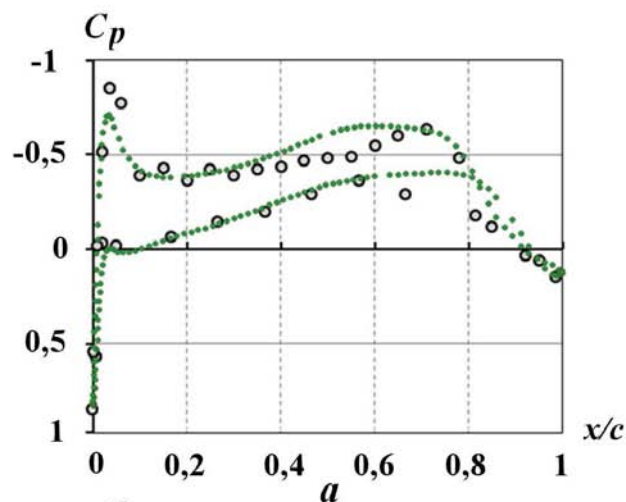
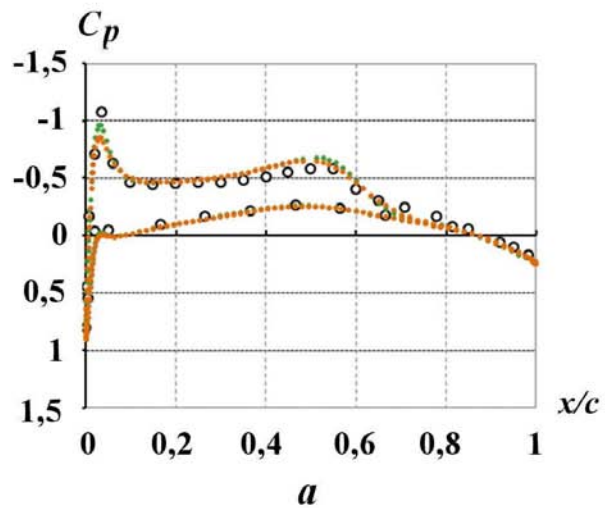


Рис. 10. Задача 2. Распределения  $C_p$  в сечениях для режима 3:  $a - z = 0,239$ ;  $b - z = 1,077$ ;  $v - z = 1,184$ ; ● — расчет с моделью SST; ● — расчет с моделью SA; ○ — эксперимент

Рис. 11. Задача 2. Распределения  $C_p$  в сечениях для режима 4:  $a - z = 0,239$ ;  $b - z = 1,077$ ;  $v - z = 1,184$ ; ● — расчет; ○ — эксперимент

На рис. 13, 14 (см. также цветную вкладку) представлены поля распределения скорости и статического давления во всей области диффузора для режима *слабый скачок*, полученные с использованием моделей турбулентности SST и SA соответственно. Аналогичные результаты для режима *сильный скачок* представлены на рис. 15, 16 (см. также цветную вкладку). Из рисунков видно, что для режима *слабый скачок* обе модели турбулентности одинаково описывают поле течения, в то время как для режима *сильный скачок* поля различаются.

Такие наблюдения подтверждаются представленными на рис. 17 (см. также цветную вкладку) графиками распределения статического давления вдоль верхней стенки диффузора для двух режимов течения (на рисунке статическое давление нормировано на полное давление  $p_{tot}$ , координата  $x$  — на высоту "горла" диффузора  $h$ ). Видно, что результаты расчетов в целом хорошо согласуются с экспериментальными данными. Для режима *слабый скачок* полученное решение (см. рис. 17, а) ни с одной моделью турбулентности не описывает точно местоположение скачка уплотнения, занижая значение статического давления. Тем не менее результаты с использованием модели турбулентности SST попадают в доверительный интервал. Для режима *сильный скачок* (см. рис. 17, б) полученное решение точно описывает местоположение скачка уплотнения, где статическое давление начинает сильно расти от своего минимального значения. Наиболее точные результаты для данного режима продемонстрировала модель турбулентности Спаларта—Аллмараса.

Таблица 4

Параметры режимов задачи 3

Граничные условия	Параметр	Режимы	
		Сильный скачок	Слабый скачок
Вход	$p_{tot}$ , Па	135 000	135 000
	$T_{tot}$ , К	277,78	277,78
Выход	$p_{вых}$ , Па	97216	110 660,9

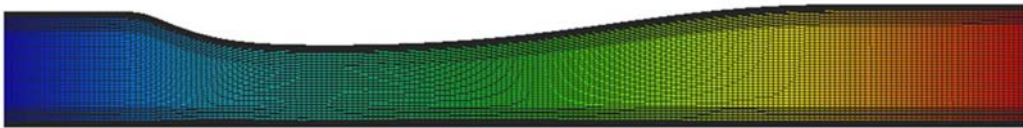


Рис. 12. Общий вид расчетной сетки задачи 3



Рис. 13. Задача 3. Распределение скорости и статического давления в диффузоре для режима *слабый скачок*; модель турбулентности SST



Рис. 14. Задача 3. Распределение скорости и статического давления в диффузоре для режима *слабый скачок*; модель турбулентности SA



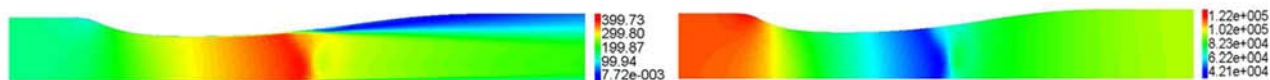


Рис. 15. Задача 3. Распределение скорости и статического давления в диффузоре для режима *сильный скачок*; модель турбулентности SST



Рис. 16. Задача 3. Распределение скорости и статического давления в диффузоре для режима *сильный скачок*; модель турбулентности SA

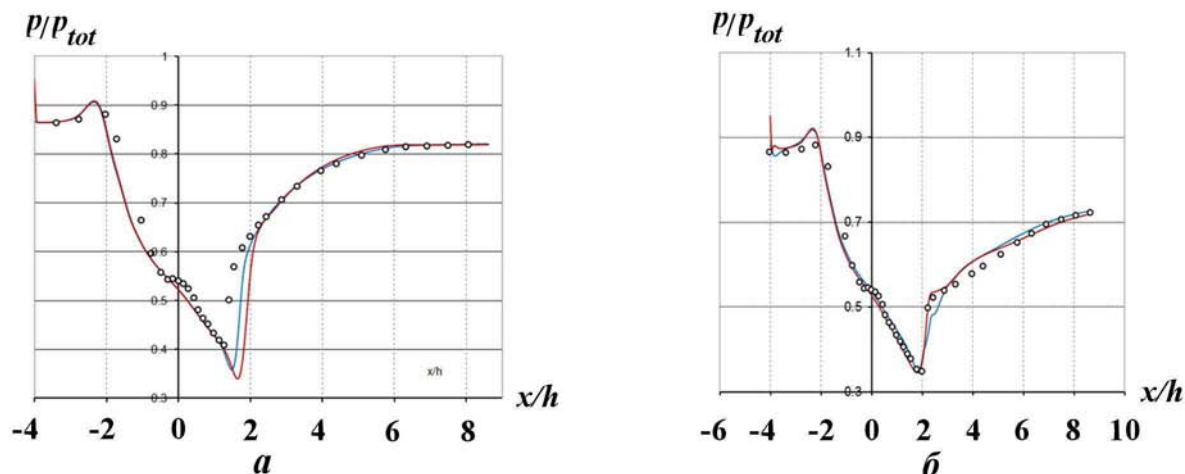


Рис. 17. Задача 3. Распределения статического давления вдоль верхней стенки диффузора: *a* — слабый скачок уплотнения; *b* — сильный скачок уплотнения; — расчет с моделью SST; — расчет с моделью SA;  $\circ$  — эксперимент

Таким образом, данную методику можно применять для расчета внутренних течений и получать достоверные результаты. Такие результаты обладают приемлемой точностью. Особое внимание следует уделять выбору модели турбулентности, наиболее подходящей для данного класса задач.

## Выводы

Проанализирована применимость метода SIMPLE для расчета сжимаемых течений. Выполнено сравнительное тестирование схем аппроксимации и ограничителей потока с целью определения степени влияния данных параметров на локальные и интегральные характеристики потока. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

В результате исследований можно сделать вывод о том, что алгоритм применим для расчета задач внешних и внутренних трансзвуковых течений с некоторыми ограничениями, которые для каждого класса задач могут быть своими. Так, например, для задач внешнего обтекания область рассмотрения ограничивается значениями числа Маха до 0,85. Это связано с недостаточной точностью группы методов типа SIMPLE для описания скачка уплотнения.

По результатам исследований определена стратегия проведения расчетов. Указаны оптимальные счетные параметры решателя. Выработаны общие рекомендации в этом направлении:

1. Необходимо использовать схемы второго порядка точности с коэффициентом перемешивания, как можно большим, применяя для устойчивости на первых итерациях описанную выше стратегию с использованием ограничителей и противопоточной схемы.
2. Поскольку используется релаксация типа SIMPLEC, т. е.  $\alpha_p = 1 - \alpha_u$ , то чем больше релаксация по скорости, тем меньше неявная релаксация для давления. Это улучшает обусловленность матрицы для приращения давления. Приведенные расчеты проводились с коэффициентом релаксации  $\alpha_u \geq 0,85$ .

Часть расчетов проводилась с использованием моделей турбулентности Спаларта—Аллмараса и Ментера. Для разных классов задач лучшие результаты достигаются на разных моделях. Необходимо проводить отдельное численное исследование по их определению.

Следует отметить, что представленный алгоритм реализован в рамках отечественного программного кода ЛОГОС, который обладает гибкостью в плане расширения функционала, что практически невозможно при использовании коммерческих пакетов программ. Это позволит адаптировать код для решения задач в тех областях, в которых это будет востребовано.

### Список литературы

1. *Patankar S. V.* Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. N. Y., Washington: Hemisphere Publ. Corp., 1980.
2. *Ferziger J. H., Peric M.* Computational Method for Fluid Dynamics. New York: Springer, 2002.
3. *Стрелец М. Х., Шур М. Л.* Метод масштабирования сжимаемости для расчета стационарных течений вязкого газа при произвольных числах Маха // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1988. Т. 28, № 2. С. 254—266.
4. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкости. М.: Мир, 1991.
5. *Van Doormaal J. R., Raithby G. D.* Enhancement of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flow // Heat Transfer. 1984. Vol. 7. P. 147—163.
6. *Hrvoj J.* Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows. Thesis. University of London, Department of Mechanical Engineering Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1996.
7. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
8. *Козелков А. С., Курулин В. В., Тятюшкина Е. С. и др.* Исследование схем дискретизации конвективного потока для моделирования турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости методом отсоединенных вихрей // Фундаментальные исследования. 2013. № 10. С. 1051—1058.
9. *Козелков А. С., Курулин В. В., Тятюшкина Е. С. и др.* Моделирование турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости на неструктурированных сетках с использованием модели отсоединенных вихрей // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, № 8. С. 81—96.
10. *Колган В. П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечноразностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГА. 1972. Т. 3, № 6. С. 68—77.
11. *Zijlema M., Wesseling P.* Higher Order Flux-Limiting Methods for Steady-State Multidimensional Convection-Dominated Flow. Delft University of Technology. Technical Report DUT-TWI-95-131, 1995.
12. *Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Лашкин С. В. и др.* Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 4. С. 44—56.
13. *Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н. и др.* Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. М.: Физматлит, 2013.

14. *Cook P. H., McDonald M. A., Firmin M. C. P.* Aerofoil RAE 2822 — pressure distributions, and boundary layer and wake measurements // Experimental Data Base for Computer Program Assessment. AGARD Advisory Report 138, 1979.
15. *Spalart P. R., Allmaras S. R.* A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows // Recherche Aerospatiale. 1994. No 1. P. 5—21.
16. *Menter F. R.* Two-equation eddy viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA J. 1994. Vol. 32, No 11. P. 1299—1310.
17. *Schmitt V., Charpin F.* Pressure distributions on the ONERA-M6-Wing at transonic Mach numbers // Experimental Data Base for Computer Program Assessment. AGARD Advisory Report 138, 1979.
18. *Stanniland D.* Investigation of the flow development on a highly swept canard/wing research model with segments leading and trailing edge flaps // Experimental Data Base for Computer Program Assessment. AGARD Advisory Report 303, 1988.

Статья поступила в редакцию 19.11.14.

SPECIFICS OF THE SIMPLE ALGORITHM APPLICATION FOR THE CALCULATION OF INCOMPRESSIBLE FLOWS / N. V. Tarasova, A. S. Kozelkov, D. P. Meleshkina, A. V. Lashkin, O. V. Denisova, M. A. Sizova (FSUE RFNC-VNIEF, Sarov, Nizhny Novgorod region).

This paper describes the modification of the SIMPLE algorithm for the case of incompressible flows and the study of the applicability of the implemented algorithm for the calculation of transonic compressible flows within the LOGOS program package. The problems about flow over an airfoil and inside a diffuser are used to demonstrate the capabilities of the implemented algorithm in terms of reaching acceptable accuracy and convergence velocity when various schemes of convective component discretization are used and other computational parameters are changed. The obtained results are compared with the data of well known experimental tests.

*Keywords:* SIMPLE algorithm, incompressible transonic flows, schemes of convective component discretization, LOGOS program package.

---

УДК 519.6

## СШИВАНИЕ МНОГОГРАННЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК В МЕТОДИКЕ "ТИМ-3D"

И. В. Соболев, А. В. Шурыгин  
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Дается описание алгоритма, реализующего метод сшивания многогранных неструктурированных сеток. Данный метод реализован в программе расчета начальных данных методики ТИМ-3D. Применимость метода продемонстрирована на примерах сшивания различных типов сеток в единую счетную сетку области. Проведено исследование быстродействия алгоритма, выполняющего сшивание трехмерных сеток.

*Ключевые слова:* методика ТИМ-3D, неструктурированные многогранные сетки, метод сшивания, ТИМ-РНД, ЛОГОС-Препост.

### Введение

Методика ТИМ-3D [1, 2] предназначена для решения трехмерных нестационарных задач механики сплошной среды на неструктурированных лагранжевых сетках произвольного вида. При решении таких задач часто приходится строить начальную сетку в достаточно сложных геометриях. В таких случаях целесообразно разбивать геометрию на более простые фрагменты, далее в каждом фрагменте строить сетку соответствующего типа и затем, используя метод сшивания, объединять все фрагменты в единую счетную сетку области. Такой подход позволяет строить сетку достаточно хорошего качества в областях сложной формы.

Метод сшивания основан на быстром алгоритме установления соответствия между двумя поверхностями, состоящими из плоских выпуклых многоугольников. Этот метод обобщается на произвольное количество тел, кроме того, границы сшиваемых поверхностей этих тел могут полностью или частично не совпадать.

### 1. Алгоритмы сшивания поверхностей и трехмерных сеток

**Соответствие между поверхностями в пространстве.** Пусть в трехмерном пространстве заданы две поверхности, состоящие из многоугольников, которые будем называть гранями поверхностей. Предположим, что грани одной из поверхностей (назовем ее основной) являются плоскими и выпуклыми. Другую поверхность назовем вспомогательной и будем предполагать, что ее грани являются произвольными несамопересекающимися многоугольниками.

**Определение 1.** Пусть грань  $P$  основной поверхности лежит в плоскости  $\pi$ . Будем говорить, что внутренняя вершина  $V$  вспомогательной поверхности соответствует грани  $P$ , если ее ортогональная проекция  $U$  на плоскость  $\pi$  находится строго внутри многоугольника  $P$  (рис. 1). Точку  $U$  назовем проекцией вершины  $V$  на основную поверхность.

**Определение 2.** Пусть ребро  $AB$  основной поверхности разделяет грани  $P_1$  и  $P_2$ , лежащие в плоскостях  $\pi_1$  и  $\pi_2$  соответственно. Пусть  $l$  — прямая, содержащая отрезок  $AB$ ,  $\rho_i$  — плоскость, проходящая через прямую  $l$  перпендикулярно к  $\pi_i$ , и  $H_i$  — полупространство, ограниченное плоскостью  $\rho_i$  и не содержащее многоугольника  $P_i$ . Будем говорить, что внутренняя вершина  $V$  вспомогательной поверхности соответствует ребру  $AB$ , если она лежит внутри или на границе

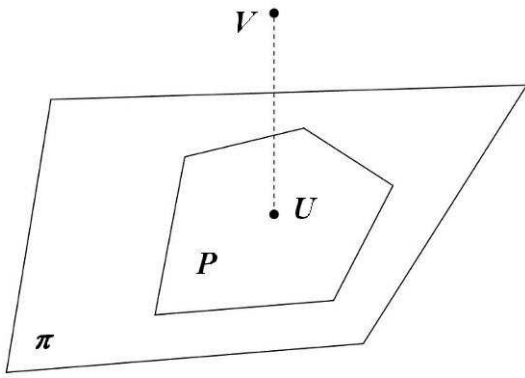


Рис. 1. Вершина  $V$  соответствует грани  $P$

двугранного угла, образованного пересечением полупространств  $H_1$  и  $H_2$ , и ее проекция  $U$  на прямую  $l$  находится строго внутри отрезка  $AB$  (рис. 2). Точку  $U$  назовем проекцией вершины  $V$  на основную поверхность.

**Определение 3.** Пусть во внутренней вершине  $A$  основной поверхности сходятся ребра  $AB_1, \dots, AB_n$ . Обозначим через  $\rho_i$  плоскость, проходящую через точку  $A$  перпендикулярно к отрезку  $AB_i$ . Пусть  $H_i$  — полупространство, ограниченное плоскостью  $\rho_i$  и не содержащее отрезка  $AB_i$ . Будем говорить, что внутренняя вершина  $V$  вспомогательной поверхности соответствует вершине  $A$ , если она лежит внутри или на границе многогранного угла, образованного пересечением полупространств  $H_i$  (рис. 3). Проекцией вершины  $V$  на основную поверхность назовем точку  $A$ .

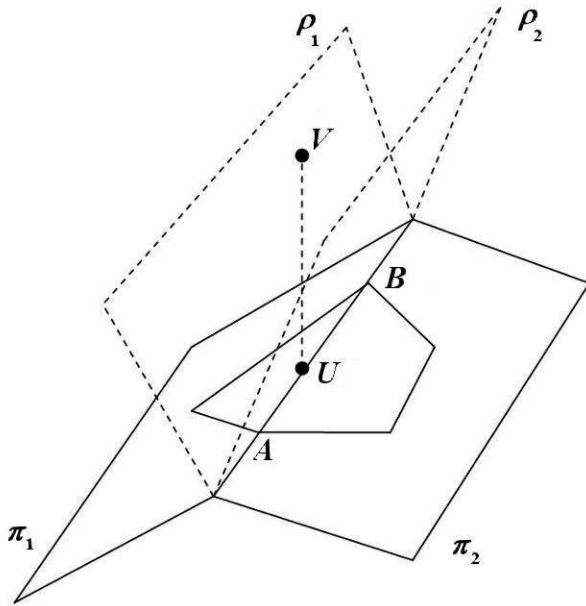


Рис. 2. Вершина  $V$  соответствует ребру  $AB$

Пусть теперь даны две многоугольные поверхности: основная  $S_1$  и вспомогательная  $S_2$ . Рассмотрим ребро  $AB$  поверхности  $S_2$ . Пусть  $A'$  и  $B'$  — проекции вершин  $A, B$  на поверхность  $S_1$ . Плоскость, проходящая через точки  $A', B'$  и  $A$ , пересечет  $S_1$  по некоторой ломаной. Часть этой ломаной, лежащую между точками  $A'$  и  $B'$ , назовем проекцией ребра  $AB$  на  $S_1$ . Проекция всех ребер вспомогательной поверхности разбивают грани основной поверхности на некоторые многоугольники. Обозначим через  $S$  поверхность, состоящую из этих многоугольников. Будем говорить, что  $S$  получена сшиванием поверхностей  $S_1$  и  $S_2$ .

Построение поверхности  $S$  происходит в два этапа. На первом этапе для каждой вершины поверхности  $S_2$  ищется грань, ребро или вершина поверхности  $S_1$ , которой она соответствует. На втором этапе грани поверхности  $S_1$  разрезаются проекциями ребер поверхности  $S_2$ .

Для практических приложений необходимо не только построить поверхность  $S$ , но и установить соответствие между гранями и вершинами поверхностей  $S$  и  $S_i$ . Каждая грань поверхности  $S_1$  после второго этапа оказывается разбитой на меньшие грани поверхности  $S$ . Аналогично, проекции ребер каждой грани поверхности  $S_2$  образуют на поверхности  $S$  некоторую замкнутую ломаную, внутри которой лежат грани  $S$ . Для каждой грани поверхности  $S_i$  будем также вычислять множество граней поверхности  $S$ , на которые она разбивается после сшивания.

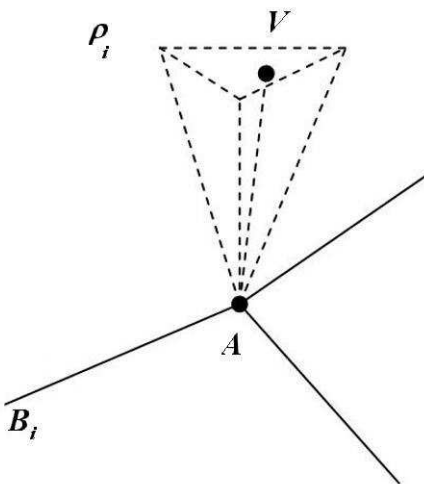


Рис. 3. Вершина  $V$  соответствует вершине  $A$

**Установление соответствия между поверхностями.** Используемый алгоритм основан на следующей идее. Предположим, что вершина  $V$  поверхности  $S_2$  соответствует грани  $P$  поверхности  $S_1$ . Пусть вершина  $U$  является концом ребра поверхности  $S_2$ ; другим концом этого ребра является вершина  $V$ . Естественно предположить, что вершина  $U$  соответствует некоторой грани  $Q$ , "близкой" к  $P$  (возможно даже  $Q = P$ ). Поиск соответствия для вершины  $U$  начнем с грани  $P$ . Если  $U$  соответствует  $P$ , то для  $U$  задача решена; если нет, то рассмотрим грани  $P_1, \dots, P_n$ , соседние с  $P$  через ребро или вершину, и проверим, не соответствует ли  $U$  какой-либо из них. Если  $U$  не соответствует никакой из граней  $P_i$ , повторим для каждой из них ту же процедуру, что для  $P$ . Таким образом будем проверять все более далекое окружение грани  $P$ , пока не найдем соответствия для  $U$ .

Общая схема алгоритма такова. Сначала из каких-либо соображений строится множество вершин поверхности  $S_2$ , для которых соответствие с поверхностью  $S_1$  известно (обозначим это множество через  $R_1$ ). Далее, если построено множество  $R_n$ , то строится множество  $R_{n+1}$ , содержащее  $R_n$  и обладающее тем свойством, что для любой вершины  $U \in R_{n+1}$  существует вершина  $V \in R_n$  такая, что  $U$  и  $V$  являются концами некоторого ребра поверхности  $S_2$ . После этого устанавливается соответствие между вершинами множества  $R_{n+1}$ , не принадлежащими  $R_n$ , и гранями поверхности  $S_1$  в предположении, что для  $R_n$  это соответствие уже установлено. Данная процедура повторяется, пока множество  $R_{n+1}$  не совпадет с  $R_n$ .

Для того чтобы реализовать описанную схему, нужно иметь данные о соседстве между гранями, ребрами и вершинами многоугольной поверхности. Структура, хранящая эту информацию, аналогична структуре данных о двумерной многоугольной неструктурированной сетке методики ТИМ-2D [3] и имеет следующие свойства:

1. Элементами структуры являются грань, ребро и вершина.
2. Для грани хранится список ребер, перечисленных в порядке положительного направления обхода, которое задается ориентацией поверхности.
3. Для ребра хранятся две грани, которые оно разделяет, и две вершины, являющиеся его концами. Эти грани и вершины упорядочены так, что обход данного ребра в первой грани осуществляется от первой вершины ко второй в положительном направлении.
4. Для ребра, лежащего на границе поверхности, вместо номера первой грани хранится номер границы со знаком минус.
5. Для вершины хранится число границ, сходящихся в ней, и номер одного из сходящихся в ней ребер (опорное ребро).
6. Хранятся координаты вершин и центров граней.

Опишем теперь шаги алгоритма более подробно.

**Построение множества  $R_1$ .** Рассмотрим три случая.

1. Границы поверхностей  $S_i$  непустые и являются объединением незамкнутых ломаных. Концы этих ломаных назовем угловыми точками. Пусть  $D_1, \dots, D_n$  — угловые точки поверхности  $S_2$ ;  $C_1, \dots, C_n$  — угловые точки поверхности  $S_1$ . Будем считать, что вершина  $D_i$  соответствует ближайшей к ней вершине  $C_{j(i)}$ . Пусть граничная ломаная  $M_{rt}$  поверхности  $S_2$  имеет концы  $D_r, D_t$ , а граничная ломаная  $L_{rt}$  поверхности  $S_1$  — концы  $C_{j(r)}, C_{j(t)}$ . Пусть  $V_1 = D_r, V_2, \dots, V_{k-1}, V_k = D_t$  — вершины ломаной  $M_{rt}$ ;  $U_1 = C_{j(r)}, U_2, \dots, U_{l-1}, U_l = C_{j(t)}$  — вершины ломаной  $L_{rt}$ . Если вершина  $V_a$  соответствует ребру  $U_b U_{b+1}$  или одной из его граничных вершин, то для определения соответствия для вершины  $V_{a+1}$  будем последовательно перебирать ребра  $U_i U_{i+1}$  для всех  $i \geq b$ . Таким образом установим соответствие между всеми граничными вершинами поверхности  $S_2$  и граничными ребрами и вершинами поверхности  $S_1$ .

2. Границы поверхностей  $S_i$  непустые и представляют собой набор замкнутых ломаных. Пусть  $L_1, \dots, L_n$  — компоненты границы поверхности  $S_1$ ;  $M_1, \dots, M_n$  — компоненты границы поверхнос-

ти  $S_2$ . Пусть  $V_i$  — произвольная вершина ломаной  $M_i$ . С помощью полного перебора найдем все ребра ломаных  $L_1, \dots, L_n$ , которым соответствует  $V_i$ , и выберем среди них то, для которого расстояние от вершины  $V_i$  до ее проекции на поверхность  $S_1$  минимально. Пусть это ребро принадлежит ломаной  $L_{j(i)}$ . Будем считать, что вершины ломаной  $M_i$  соответствуют ребрам или вершинам ломаной  $L_{j(i)}$ . В остальном определение соответствия между границей поверхности  $S_2$  и поверхностью  $S_1$  аналогично первому случаю.

3. Границы поверхностей  $S_i$  пусты. Возьмем произвольную вершину  $V$  поверхности  $S_2$  и полным перебором получим все грани, ребра и вершины поверхности  $S_1$ , которым соответствует  $V$ . Среди всех проекций вершины  $V$  на поверхность  $S_1$  выберем ту, для которой расстояние до  $V$  минимально.

В случаях 1 и 2 множество  $R_1$  состоит из всех граничных вершин поверхности  $S_2$ , в случае 3 — из одной вершины.

**Переход от множества  $R_n$  к множеству  $R_{n+1}$ .** Пусть построено множество  $R_n$  вершин поверхности  $S_2$ , для которых установлено соответствие с поверхностью  $S_1$ . Для вершины  $V$  многоугольной поверхности обозначим через  $L(V)$  множество вершин, являющихся концами ребер, сходящихся в  $V$ . Положим  $R_{n+1} = \bigcup_{V \in R_n} L(V)$ . Пусть  $V \in R_{n+1}$  и  $V \notin R_n$ . По определению существует вершина  $U \in R_n$  такая, что  $U$  и  $V$  являются концами ребра поверхности  $S_2$ . Пусть вершина  $U$  соответствует грани  $C(U)$  поверхности  $S_2$  (если  $U$  соответствует ребру или вершине, то в качестве  $C(U)$  возьмем любую грань, на границе которой лежит проекция вершины  $U$ ). Обозначим через  $C_n(V)$  последовательность множеств граней поверхности  $S_1$ , которую построим рекуррентно. Также понадобятся последовательности множеств ребер  $EI_n(V)$ ,  $EO_n(V)$  и вершин  $VI_n(V)$ ,  $VO_n(V)$  поверхности  $S_1$ . Для вершины  $W$  и грани  $D$  многоугольной поверхности обозначим через  $E(W)$  и  $C(W)$  множества ребер и граней, сходящихся в  $W$ , через  $V(D)$  — множество вершин многоугольника  $D$ .

Положим  $C_1(V) = \{C(U)\}$ ;  $EI_1(V) = \emptyset$ ;  $VI_1(V) = \emptyset$ ;  $VO_1(V) = V(C(U))$ ;  $EO_1(V) = \bigcup_{W \in VO_1(V)} E(W)$ . Если определены множества  $C_n(V)$ ,  $EI_n(V)$ ,  $EO_n(V)$ ,  $VI_n(V)$ ,  $VO_n(V)$ , то положим

$$EI_{n+1}(V) = EO_n(V); \quad VI_{n+1}(V) = VO_n(V); \quad C_{n+1}(V) = \left( \bigcup_{W \in VO_n(V)} C(W) \right) / C_n(V);$$

$$VO_{n+1}(V) = \left( \bigcup_{D \in C_{n+1}(V)} V(D) \right) / VO_n(V); \quad EO_{n+1}(V) = \left( \bigcup_{W \in VO_{n+1}(V)} E(W) \right) / EO_n(V).$$

Будем проверять соответствие вершины  $V$  поверхности  $S_1$  последовательно для всех множеств  $C_n(V)$ ,  $EI_n(V)$ ,  $VI_n(V)$  при  $n = 1, 2, \dots$

Оценка сложности данного алгоритма для произвольных многоугольных поверхностей является довольно трудной задачей. Если поверхности  $S_1$  и  $S_2$  "близки" друг к другу и имеют примерно одинаковое число граней, то для каждой вершины поверхности  $S_2$  нужно будет перебрать не более чем  $O(1)$  граней поверхности  $S_1$ ; таким образом, сложность близка к линейной. Эти эвристические соображения подтверждаются результатами расчетов, приведенными в разд. 3.

**Сшивание поверхностей.** Пусть  $AB$  — ребро поверхности  $S_2$ ;  $A'$  и  $B'$  — проекции вершин  $A$  и  $B$  на поверхность  $S_1$ ; точка  $A'$  находится внутри грани  $P$ , точка  $B'$  — внутри грани  $Q$ . Рассмотрим плоскость  $\pi$ , проходящую через точки  $A'$ ,  $B'$  и  $A$ . Эта плоскость пересекает многоугольник  $P$  по отрезку  $A_1A_2$ , многоугольник  $Q$  — по отрезку  $B_1B_2$ . Ломаную  $L_{AB} = A_1A'A_2C_1 \dots C_nB_1B'B_2$ , лежащую в пересечении плоскости  $\pi$  и поверхности  $S_1$ , назовем проекцией ребра  $AB$  (рис. 4). Для построения ломаной  $L_{AB}$  используются те же алгоритмы, что и для дробления ячеек при локальных перестройках двумерной неструктурированной сетки [4].

Поверхность  $S$  строится в два этапа. На первом этапе происходит последовательное дробление граней поверхности  $S_1$  проекциями всех ребер поверхности  $S_2$ . Получившаяся в результате этого поверхность будет иметь "лишние" ребра и вершины, не соответствующие никаким ребрам и вершинам поверхности  $S_2$ . Для ребра  $AB$  лишними являются вершины  $A_1$  и  $B_2$  и ребра  $A_1A'$  и  $B'B_2$  (см. рис. 4). На втором этапе происходит объединение пар граней, разделяемых ребрами такого вида, и удаление лишних вершин.

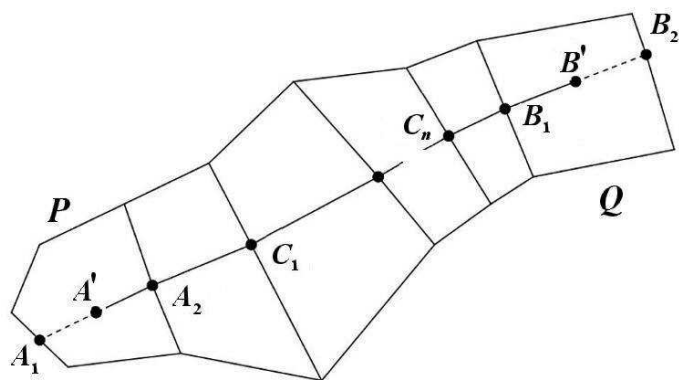


Рис. 4. Проекция ребра  $AB$  на поверхность  $S_1$

**Сшивание трехмерных многогранных сеток.** Пусть имеются две трехмерные области  $T_1$  и  $T_2$ , заполненные неструктурированными многогранными сетками. Пусть в каждой из областей  $T_i$  выделена граничная многоугольная поверхность  $S_i$ . Метод сшивания сеток, заполняющих области  $T_1$  и  $T_2$ , вдоль границ  $S_i$  состоит из следующих этапов:

1. Строится поверхность  $S$ , полученная сшиванием  $S_1$  и  $S_2$ , с указанием для каждой грани  $P$  поверхности  $S_i$  множества граней  $M(P)$  поверхности  $S$ , которое получено в результате дробления многоугольника  $P$  (при  $i = 1$ ) или его проекции на поверхность  $S_j$  (при  $i = 2$ ) ребрами поверхности  $S_j$  ( $j \neq i$ ). Также указывается соответствие между вершинами поверхностей  $S$  и  $S_2$ .
2. К первой области добавляются вершины поверхности  $S$ , не совпадающие с вершинами поверхности  $S_1$ .
3. Для всех ячеек, содержащих грани поверхностей  $S_i$ , эти грани удаляются из списка граней ячейки и заменяются на соответствующее множество граней поверхности  $S$ .
4. Если ребро грани  $P$ , не принадлежащей  $S_i$ , проходит по граничной поверхности, то к списку вершин грани  $P$  добавляются вершины поверхности  $S$ , лежащие на этом ребре.
5. К первой области добавляются вершины и грани второй области, не лежащие на поверхности  $S_2$ , а также все ячейки второй области, перенумерованные так, чтобы в сшитой области сохранилась сквозная нумерация.

## 2. Тестовые расчеты

В данном разделе будет продемонстрирована применимость описанных выше алгоритмов на различных примерах сшивания многогранных сеток различных типов. Генерация сеток, используемых в тестовых расчетах, производилась с помощью программы расчета начальных данных методики ТИМ-3D (ТИМ-РНД) [5, 6] и пакета программ ЛОГОС-Препост [7, 8].

В настоящее время реализовано сшивание трехмерных сеток с тремя типами взаимного расположения их граничных поверхностей:

1. Граница одной поверхности проецируется в границу другой (рис. 5).

На рис. 6—8 показаны примеры использования первого типа сшивания различных сеток вдоль плоской, цилиндрической и сферической (см. также цветную вкладку) поверхностей.



Рис. 5. Первый тип сшивания граничных поверхностей



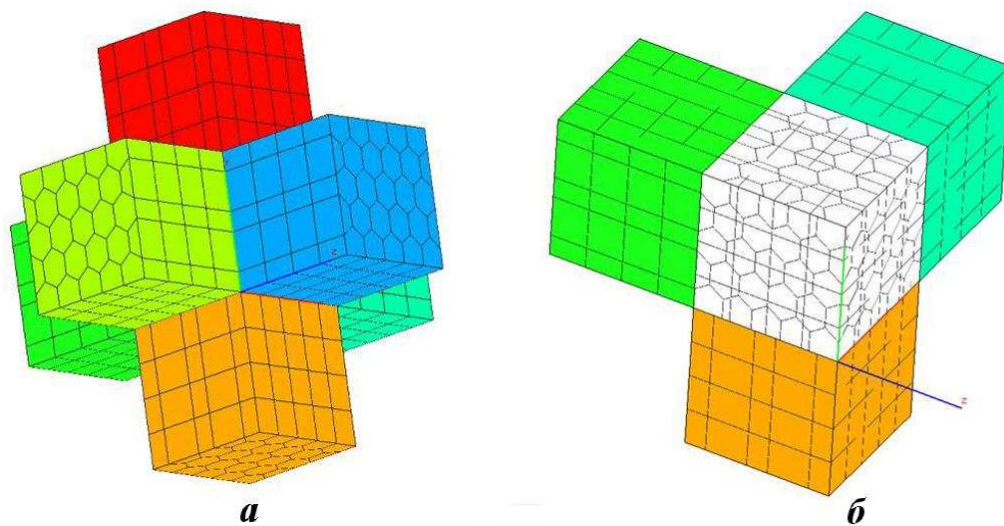


Рис. 6. Сшивание первого типа вдоль плоской границы: *a* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

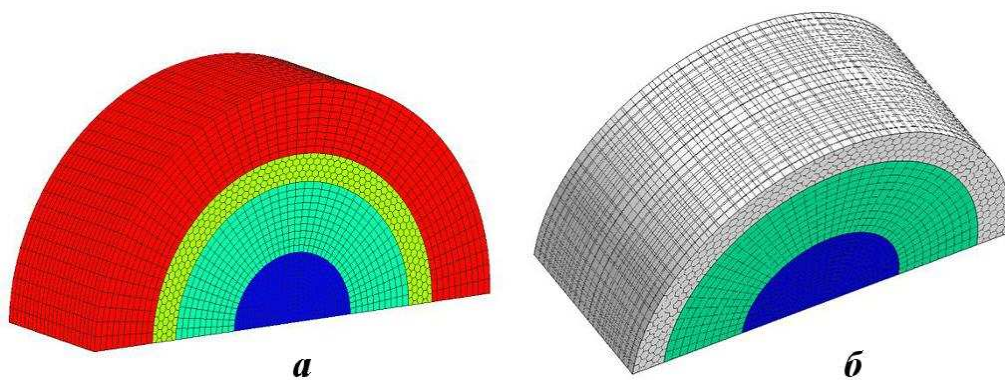


Рис. 7. Сшивание первого типа вдоль цилиндрических границ: *a* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

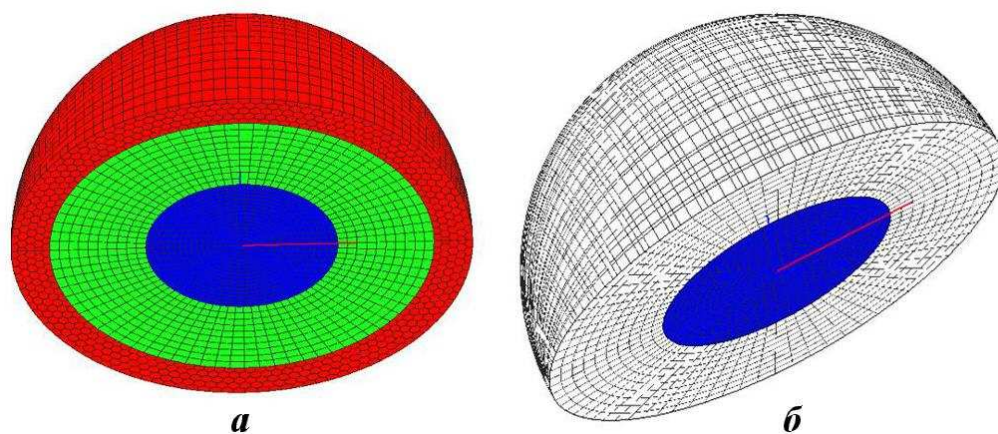


Рис. 8. Сшивание первого типа вдоль сферической границы: *a* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

2. Граница одной поверхности проецируется внутрь другой (рис. 9).

3. Часть границы одной поверхности проецируется внутрь другой (рис. 10).

На рис. 11, 12 (см. также цветную вкладку) показаны примеры использования второго и третьего типов сшивания сеток соответственно.

На рис. 13 (см. также цветную вкладку) продемонстрирован пример сшивания областей с сетками, полученными с помощью программ ЛОГОС-Препост (на рис. 13, *a* многоугольная сетка желтого

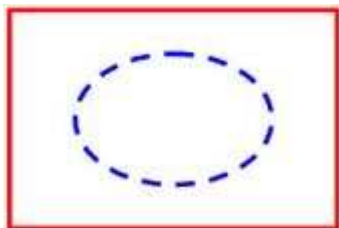


Рис. 9. Второй тип сшивания граничных поверхностей



Рис. 10. Третий тип сшивания граничных поверхностей

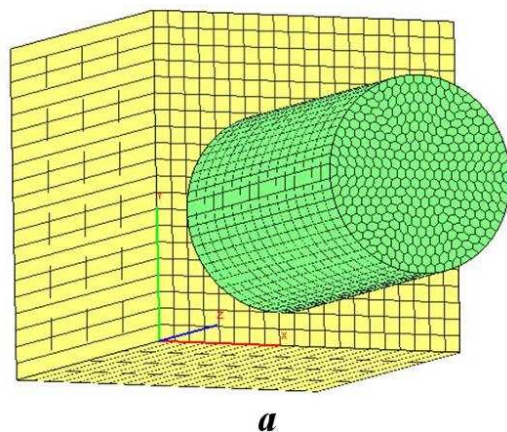


Рис. 11. Сшивание второго типа: *a* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

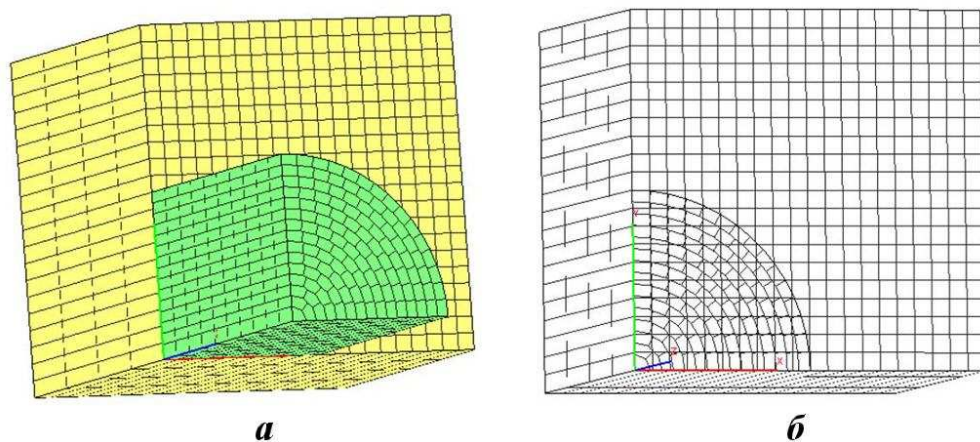


Рис. 12. Сшивание третьего типа: *a* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

цвета) и ТИМ-РНД (на рис. 13, *а* многоугольная листовая сетка зеленого цвета). На рис. 13, *б* показана сетка на границе областей после их сшивания.

На рис. 14, *а* (см. также цветную вкладку) показана геометрия задачи, состоящая из трех областей с шестигранными сетками, которые объединяются в единую сетку с помощью метода сшивания. Сетки для данной задачи были сгенерированы в пакете программ ЛОГОС-Препост. На рис. 14, *б* показана сетка на границе областей после сшивания.

На рис. 15 (см. также цветную вкладку) показан фрагмент сшиваемых областей с сетками, полученными с помощью пакета программ ЛОГОС-Препост.

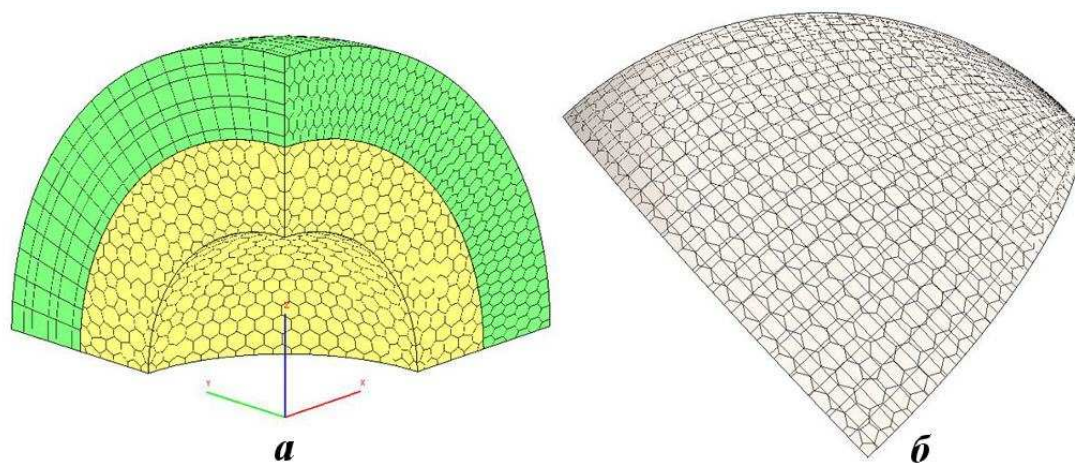


Рис. 13. Сшивание областей с сетками, полученными с помощью программ ЛОГОС-Препост и ТИМ-РНД: *а* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

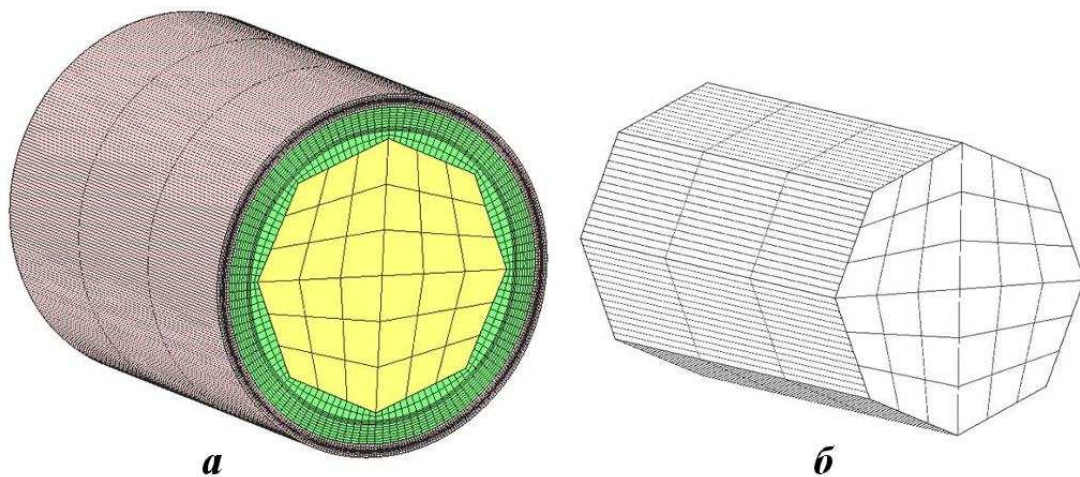


Рис. 14. Сшивание областей с сетками, полученными с помощью пакета программ ЛОГОС-Препост: *а* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

### 3. Исследование быстродействия метода сшивания

В данном разделе представлены временные затраты, необходимые для сшивания многогранных сеток в зависимости от числа ячеек и типа сшиваемых границ. Замеры по времени производились в последовательном режиме на персональном компьютере Intel Core 2 Duo 2.7ГГц с оперативной памятью 4Гбайт.

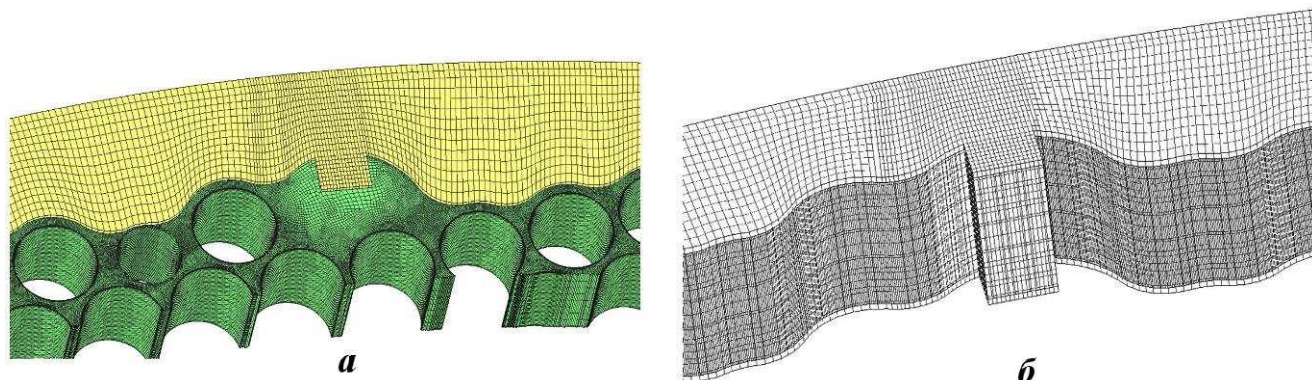


Рис. 15. Фрагмент сшиваемых областей с сетками, полученными с помощью программ ЛОГОС-Препост: *а* — сетки до сшивания; *б* — сетка на границе областей после сшивания

На рис. 16 (см. также цветную вкладку) показаны две сшиваемые сетки, имеющие плоскую границу, с различным числом ячеек: первая (зеленого цвета) состоит из шестигранных ячеек, вторая (желтого цвета) — из восьмигранных. В табл. 1 представлены характеристики сшивания этих сеток.

На рис. 17, 18 (см. также цветную вкладку) представлены сетки с различным числом ячеек, сшиваемые соответственно вдоль цилиндрической и сферической границ. В табл. 2, 3 представлены характеристики сшивания этих сеток.

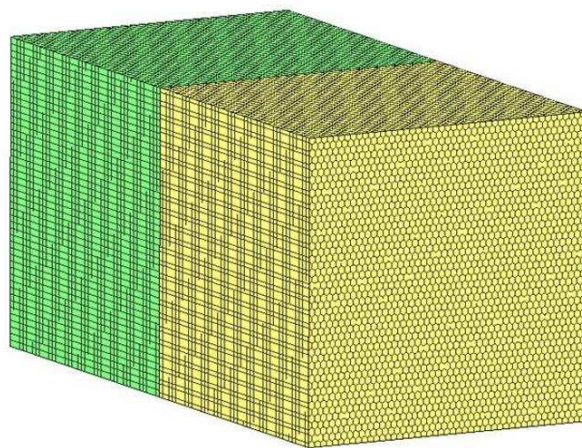


Рис. 16. Области с разным числом ячеек, сшиваемые вдоль плоской границы

Таблица 1

**Характеристики сшивания сеток вдоль плоской границы**

Число ячеек в каждой области	Число граней на границе первой сетки	Число граней на границе второй сетки	Общее время сшивания сеток, с
≈ 100 000	2 232	2 209	4,40
≈ 500 000	6 280	6 241	18,43
≈ 1 000 000	10 050	10 000	40,85

**Заключение**

Представлено описание метода сшивания трехмерных тел, заполненных неструктурированными многогранными сетками. Данный метод реализован в программе расчета начальных данных методики ТИМ. С использованием метода сшивания появилась возможность строить начальные сетки для разных классов задач в достаточно сложных геометриях.

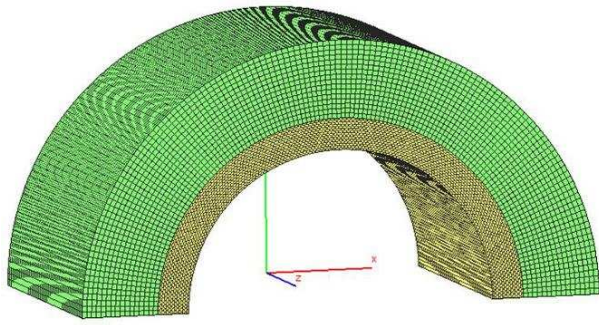


Рис. 17. Области с разным числом ячеек, сшиваемые вдоль цилиндрической границы

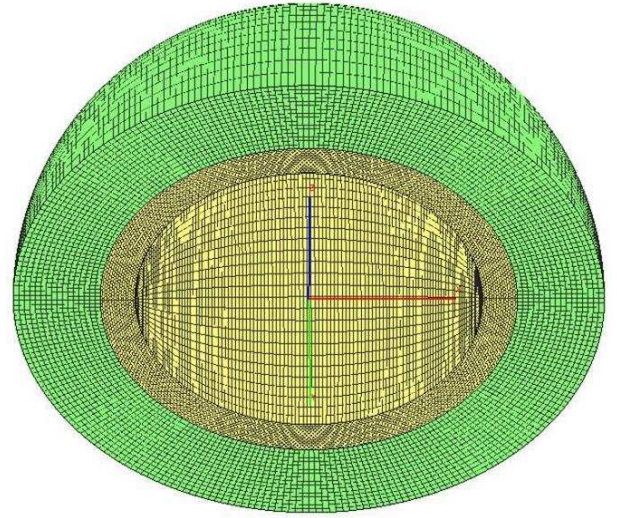


Рис. 18. Области с разным числом ячеек, сшиваемые вдоль сферической границы

Таблица 2

#### Характеристики сшивания сеток вдоль цилиндрической границы

Число ячеек в каждой области	Число граней на границе первой сетки	Число граней на границе второй сетки	Общее время сшивания сеток, с
$\approx 100\,000$	6 440	6 210	8,95
$\approx 500\,000$	19 355	18 170	31,62
$\approx 1\,000\,000$	30 000	28 500	47,36

Таблица 3

#### Характеристики сшивания сеток вдоль сферической границы

Число ячеек в каждой области	Число граней на границе первой сетки	Число граней на границе второй сетки	Общее время сшивания сеток, с
$\approx 100\,000$	6 352	6 122	7,62
$\approx 500\,000$	18 958	17 788	28,17
$\approx 1\,000\,000$	29 804	28 304	50,17

Тестовые расчеты подтверждают применимость описанных алгоритмов сшивания счетных областей и демонстрируют, что время, используемое методом сшивания, линейно зависит от количества ячеек сетки. В тестовых расчетах использовались неструктурированные сетки различных типов, сгенерированные с помощью программ ТИМ-РНД, ЛОГОС-Препост и сшитые в единую сетку счетной области с помощью программы ТИМ-РНД.

#### Список литературы

1. Соколов С. С., Панов А. И., Воропинов А. А. и др. Методика ТИМ расчета трехмерных задач механики сплошных сред на неструктурированных многогранных лагранжевых сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 3. С. 37–52.

2. Соколов С. С., Ялозо А. В. Метод расчета контактной границы для нерегулярных многогранных сеток в методике ТИМ // Там же. Вып. 4. С. 38—46.
3. Соколов С. С., Воропинов А. А., Новиков И. Г. и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Там же. 2006. Вып. 4. С. 29—43.
4. Новиков И. Г., Соколов С. С. Локальные перестройки нерегулярной сетки в методике ТИМ-2D // Сб. докл. VI науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саров, 1 ноября 2007г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 136.
5. Воропинов А. А., Соколов С. С., Панов А. И. Методика построения многогранной листовой сетки на основе многоугольной нерегулярной сетки // Там же. 2005. Вып. 4. С. 46—52.
6. Воропинов А. А., Соколов С. С. Алгоритмы построения нерегулярной многогранной сетки для методики ТИМ // Там же. 2007. Вып. 1. С. 55—66.
7. Фархутдинов В. Ф., Тарасов В. И., Соловьев А. Н. и др. Обзор возможностей по обработке геометрических и построению сеточных моделей в ЛОГОС.Препост // Тр. XIV Межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013. С. 585—592.
8. Дерюгин В. И., Дюпин В. Н., Санталов А. С. ЛОГОС.Препост. Универсальный пользовательский интерфейс задания начальных и граничных условий // Там же. С. 225—234.

Статья поступила в редакцию 24.07.14.

SEAMING POLYGONAL UNSTRUCTURED GRIDS IN THE "TIM-3D" TECHNIQUE / I. V. Sobolev, A. V. Shurygin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod Region).

The paper describes in detail the algorithm that realizes the method of seaming polygonal unstructured grids. This method is realized within the program for initial data calculation in the TIM-3D technique. The method applicability is shown on the examples of seaming various types of grids into a single computational grid of a domain. The performance of the algorithm that seams the 3D grids is studied.

*Keywords:* TIM-3D technique, unstructured polygonal grids, seaming method, TIM-RND, LOGOS-Prepost.

---

УДК 517.95+514.86

## ОБ ОДНОМ РЕЖИМЕ РАЗЛЕТА В ВАКУУМ ПЛОСКОГО СЛОЯ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

В. Е. Шемарулин, С. С. Львова, Ю. В. Янилкин  
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Найден и подробно исследован класс точных решений уравнений одномерной газовой динамики, описывающих изэнтропический разлет в вакуум идеального газа, заполняющего плоский слой конечной толщины, в случае специальным образом заданных начальных распределений газодинамических параметров при показателе адиабаты, равном 3.

В качестве примера рассмотрен частный случай, когда начальная скорость газа равна нулю, а начальная плотность распределена по квадратичному закону и обращается в нуль на границе с вакуумом. Полученное частное решение может быть использовано для тестирования методик и программ, предназначенных для численного решения задач газовой динамики.

*Ключевые слова:* уравнения одномерной газовой динамики, идеальный газ, изэнтропический разлет в вакуум, точные решения, численное решение.

### Введение

Известно, что уравнения, описывающие одномерные плоские изэнтропические течения газа, линеаризуются, если поменять ролями зависимые и независимые переменные. Например, в [1, 2] в качестве независимых переменных выбраны инварианты Римана, а в [3, 4] — скорость и удельная энтальпия. В случае политропного газа такое преобразование уравнений позволяет в замкнутой форме представить их общее решение для показателей адиабаты  $\gamma = (2m + 3)/(2m + 1)$ ,  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Особенно просто уравнения интегрируются, когда  $\gamma = 3$ . При этом даже не требуется их линеаризация, поскольку уравнения для инвариантов Римана оказываются независимыми (в этом случае система в инвариантах представляет собой пару уравнений — каждое для одного инварианта) и интегрируются методом характеристик. Однако общее решение записывается в неявном виде и не дает полного представления о возможных особенностях решений. В связи с этим представляет интерес построение специальных классов решений, обладающих какими-либо отличительными особенностями.

В настоящей работе решена одномерная задача об изэнтропическом истечении в вакуум идеального газа, заполняющего плоский слой конечной толщины для специальным образом заданных начальных распределений газодинамических параметров. Показатель адиабаты  $\gamma = 3$ . При  $t = 0$  все газодинамические величины являются непрерывными функциями переменной  $x$ ,  $-\infty < x < +\infty$ ; начальные распределения инвариантов Римана являются выпуклыми функциями.

Одна из особенностей течений состоит в том, что границы газовой области остаются неподвижными до некоторого момента времени  $t = t^*$ , после которого начинается разлет. Течения остаются гладкими всюду до момента  $t = t^*$ . При  $t \geq t^*$  градиенты плотности и скорости терпят разрыв первого рода на звуковых линиях, на плоскости  $R^2(x, t)$  границы течений становятся огибающими характеристик и кривыми градиентных катастроф — градиент плотности обращается на них в бесконечность. Между звуковыми линиями расположена область дозвукового течения, между звуковыми линиями и линиями вакуума — области сверхзвукового течения. Звуковые точки течений неподвижны.

### 1. Постановка задачи

Рассматриваются одномерные плоские изэнтропические движения политропного газа с  $\gamma = 3$ . То есть предполагается, что в области течения энтропия  $S \equiv \text{const}$ , давление  $p$  и плотность  $\rho$  связаны соотношением [2]  $p = A\rho^3$ ,  $A \equiv A(S)$ , скорость звука  $c = A_1\rho$ ,  $A_1 = \sqrt{3A}$ , а сами течения в эйлеровых переменных описываются уравнениями

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0; \quad u_t + uu_x + \frac{1}{\rho} p_x = 0. \quad (1)$$

При  $t = 0$  газ заполняет плоский слой  $a_2 \leq x \leq a_1$ ,  $a_2 < 0 < a_1$ , вне которого находится вакуум. Состояние газа задано соотношениями

$$\begin{aligned} u(x, 0) = u_0(x), \quad \rho(x, 0) = \rho_0(x), \quad a_2 \leq x \leq a_1; \\ u_0(a_2) = u_0(a_1) = 0; \quad \rho_0(a_2) = \rho_0(a_1) = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $u_0(x)$ ,  $\rho_0(x)$  — известные дважды непрерывно дифференцируемые функции такие, что распределения  $r(x, 0) = r_0(x)$ ,  $l(x, 0) = l_0(x)$  инвариантов Римана удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} l_0 \leq 0; \quad r_0 \geq 0; \quad l'_0 < 0 \text{ при } x < b, \quad l'_0 > 0 \text{ при } x > b; \quad l''_0 > 0; \quad a_2 < b < a_1; \\ r'_0 > 0 \text{ при } x < 0, \quad r'_0 < 0 \text{ при } x > 0; \quad r''_0 < 0. \end{aligned} \quad (3)$$

В частности, функции  $r_0(x)$  и  $l_0(x)$  являются выпуклыми вверх и вниз соответственно.

Требуется найти решение задачи Коши (1)–(3) и исследовать соответствующее течение газа.

**Инварианты Римана и характеристики.** Задача (1)–(3) решается методом характеристик. Для  $\gamma = 3$  инварианты Римана  $r = u + c$ ,  $l = u - c$ ; система (1) эквивалентна системе в инвариантах

$$r_t + rr_x = 0; \quad l_t + ll_x = 0; \quad (4)$$

звуковые характеристики  $C_+$  и  $C_-$  являются прямыми; контактных характеристик  $C_0$  в изэнтропических течениях нет [2]. Характеристики, проходящие через точку  $(x, 0)$ , имеют уравнения

$$C_+ : \quad x(t) = x + r_0(x)t; \quad C_- : \quad x(t) = x + l_0(x)t. \quad (5)$$

**Огибающие семейств характеристик.** В верхней полуплоскости  $R^2(x, t)$ ,  $t > 0$  характеристики семейств (5) с параметром  $a_2 < x < a_1$  заполняют область, правой границей  $\gamma_+$  которой является огибающая  $C_+$ -характеристик с параметром  $0 < x \leq a_1$ , а левой границей  $\gamma_-$  — огибающая  $C_-$ -характеристик с параметром  $a_2 \leq x < b$ . Расположение характеристик в симметричном случае, когда  $u_0(x) = 0$ ,  $\rho_0(x) = 1 - x^2$ ,  $a_2 = -1$ ,  $a_1 = 1$ , показано на рис. 1.

В силу качественной "симметрии" начальных данных для анализа свойств решения достаточно ограничиться рассмотрением первой четверти плоскости  $R^2(x, t) : x > 0, t > 0$ .

Пусть в области  $x > 0$  уравнение  $r = r_0(x)$ , определяющее начальное распределение инварианта Римана, разрешено относительно переменной  $x$ :  $x = f(r)$ ;  $f'(r) < 0$ ;  $f''(r) < 0$ . Тогда правая граница  $\gamma_+$  имеет параметрические уравнения

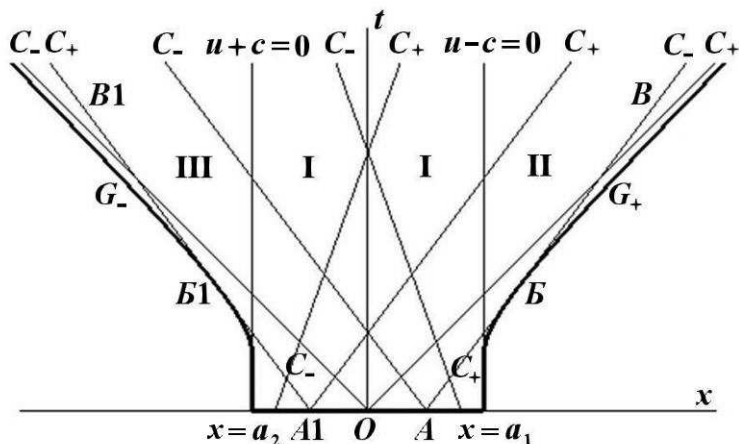


Рис. 1. Поведение характеристик и кривой  $\gamma = \gamma_+ \cup \gamma_-$  ( $G_+ \cup G_-$ ) градиентных катастроф



$$x = f(r_0) - r_0 f'(r_0); \quad t = -f'(r_0); \quad r_0(a_1) = 0 < r_0 < r_0(0), \quad (6)$$

где параметр  $r_0$  — значение инварианта  $r$  в точке  $(x_0, 0)$ .  $C_+$ -характеристика, проходящая через точку  $(x_0, 0)$ , касается кривой  $\gamma_+$  в точке  $(x, t)$  с координатами (6). Тогда функция  $x = x(t)$ , определенная уравнениями (6), является преобразованием Лежандра функции  $-f(r)$  [5]. Преобразование Лежандра сохраняет свойство выпуклости, откуда для функции  $x = f(r)$  следует, что кривая  $\gamma_+$  выпукла вверх. Кроме того,  $\gamma_+$  лежит в области  $x \geq a_1$ , асимптотически приближается к прямой  $x = r_0(0)t$  (см. ниже) и имеет вертикальную касательную в своей начальной точке  $(a_1, -f'(0))$ , соответствующей параметру  $r_0 = 0$ , поскольку прямая  $x = a_1$  является  $C_+$ -характеристикой. Преобразование Лежандра инволютивно, т. е. его квадрат равен тождественному преобразованию. Поэтому функцию (6), задающую огибающую, оно переводит в функцию  $-f(r)$ , противоположную функции  $x = f(r)$ , определяющей начальное распределение инварианта  $r$ . Таким образом, задание выпуклого распределения  $r = r_0(x)$ ,  $0 < x \leq a_1$ , с отмеченными свойствами эквивалентно заданию выпуклой кривой  $\gamma_+$  в области  $x > 0$ ,  $t > 0$ , имеющей асимптоту и касающейся вертикальной прямой  $x = a_1$ .

**Кривая градиентных катастроф.** Градиентная катастрофа по  $r$ -инварианту на  $C_+$ -характеристике (обращение в бесконечность производной  $r_x$ ) происходит в точке ее касания с огибающей  $\gamma_+$ , являющейся правой частью кривой градиентных катастроф. Момент  $t_k$  наступления этой катастрофы на  $C_+$ -характеристике, проходящей через точку  $(x_0, 0)$ , определяется равенством [1, 2, 6] (переменная  $x_0$  параметризует семейство характеристик)

$$t_k = -\frac{1}{r'_0(x_0)}. \quad (7)$$

Равенство (7) непосредственно следует из (6), поскольку  $f'(r_0) = 1/r'_0(x_0)$ .

Первоначально градиентная катастрофа наступает на  $C_+$ -характеристике, выходящей из точки  $(a_1, 0)$ . Далее она распространяется по  $C_+$ -характеристикам в сторону убывания параметра  $x_0$ , все время оставаясь на кривой  $\gamma_+$ . Таким образом, при  $r'_0(a_1) \neq -\infty$ , по крайней мере до момента времени  $t = t_k = -1/r'_0(a_1) > 0$ , в области  $x > 0$  течение является гладким. Более того, до момента  $t_k$  правая граница течения остается неподвижной, поскольку огибающая  $\gamma_+$  касается вертикальной  $C_+$ -характеристики — прямой  $x = a_1$ . Поскольку  $r'_0(0) = 0$  (см. (3)), на  $C_+$ -характеристике  $x = r(0)t$  градиентной катастрофы не происходит и прямая  $x = r_0(0)t$  является асимптотой кривой  $\gamma_+$ .

Аналогичные утверждения распространяются на градиентную катастрофу по  $l$ -инварианту на  $C_-$ -характеристиках, происходящую на кривой  $\gamma_-$  — огибающей  $C_-$ -характеристик, и на характер течения в области  $x < 0$ .  $\gamma_-$  является левой частью кривой градиентных катастроф.

## 2. Решение задачи

Покажем, что областью определения искомого непрерывного течения является изображенная на рис. 1 область, лежащая выше жирной кривой. Эта область естественным образом разбивается на три подобласти — I, II, III. Область I расположена между прямыми  $x = a_2$  и  $x = a_1$ , в области II  $x > a_1$ , в области III  $x < a_2$ .

В силу условий (3) через любую точку области I проходит по одной  $C_+$ - и  $C_-$ -характеристике, начинающейся на интервале  $(a_2, a_1)$  при  $t = 0$ . Следовательно, в этой области решение однозначно определено начальными условиями (2). Согласно тем же условиям (3) в области I  $r > 0$ ,  $l < 0$ , т. е.  $-c < u < c$  и течение является дозвуковым.

Через любую точку области II проходит пара  $C_+$ -характеристик, выходящих из точек интервала  $(a_2, a_1)$  при  $t = 0$ . При этом  $C_+$ -характеристики, начинающиеся на интервале  $(0, a_1)$ , имеют в качестве огибающей кривую  $\gamma_+$  градиентных катастроф. Так как  $\gamma_+$  — граница области предполагаемого течения, то она должна быть траекторией частицы и линией вакуума. Следовательно,

на  $\gamma_+$  должны быть выполнены равенства  $c = 0$ ,  $\rho = 0$ ,  $p = 0$ , а значит, и равенства  $r|_{\gamma_+} = l|_{\gamma_+} = u|_{\gamma_+} = x'(t)$ . Так как течение предполагается непрерывным, то через любую точку области II должна проходить только одна  $C_+$ -характеристика. Поскольку  $C_+$ - и  $C_-$ -характеристики должны касаться линии вакуума  $\gamma_+$ , это означает, что для любой прямой  $ABB$ ,  $A \in (0, a_1]$  (см. рис. 1), касающейся кривой  $\gamma_+$ , отрезок  $AB$  должен быть  $C_+$ -характеристикой, в то время как его продолжение, луч  $BB$ , —  $C_-$ -характеристикой. Это уже однозначно определяет решение в области II. Наклон  $C_-$ -характеристики, совпадающий с наклоном прямой  $ABB$ , будет положительным:  $\frac{dx}{dt} = l(B) = r(A) > 0$ . Следовательно, в области II  $l = u - c > 0$  и течение является сверхзвуковым. На вертикальной  $C_-$ -характеристике  $x = a_1$   $\frac{dx}{dt} = u - c = 0$ , следовательно, она является звуковой линией.

Аналогично, область III является областью сверхзвукового течения, а  $C_+$ -характеристика  $x = a_2$  — звуковой линией.

Понятно, что найденное решение допускает продолжение в область  $t < 0$ , которое может быть построено таким же образом.

**О гладкости решения.** Пусть начальные распределения инвариантов  $r = r_0(x)$  и  $l = l_0(x)$  являются гладкими функциями класса  $C^k$ . Решение задачи (1)–(3) в точке  $(x, t)$  определяется равенствами  $u(x, t) = (r + l)/2$ ;  $c(x, t) = (r - l)/2$ . При этом для области I  $r = r(x_{0,2})$ ;  $l = l(x_{0,1})$ ; функции

$$x_{0,2} = x_{0,2}(x, t); \quad x_{0,1} = x_{0,1}(x, t) \quad (8)$$

находятся из уравнений

$$x = x_{0,2} + r_0(x_{0,2})t; \quad x = x_{0,1} + l_0(x_{0,1})t. \quad (9)$$

Для области II  $r = r(x_{0,2})$ ;  $l = l(x_{0,1})$ ; функции (8) находятся из уравнений

$$x = x_{0,2} + r_0(x_{0,2})t; \quad x = x_{0,1} + r_0(x_{0,1})t. \quad (10)$$

Для области III  $r = l(x_{0,2})$ ;  $l = l(x_{0,1})$ ; функции (8) находятся из уравнений

$$x = x_{0,2} + l_0(x_{0,2})t; \quad x = x_{0,1} + l_0(x_{0,1})t. \quad (11)$$

При этом всегда  $x_{0,2} < x_{0,1}$ . Так как равенства  $1 + r'_0(x_{0,i})t = 0$  и  $1 + l'_0(x_{0,i})t = 0$ ,  $i = 1, 2$ , выполняются только на соответствующих частях огибающих семейств характеристик, то всюду в области определения течения  $1 + r'_0(x_{0,i})t \neq 0$  и  $1 + l'_0(x_{0,i})t \neq 0$ ,  $i = 1, 2$ . Поэтому уравнения (9)–(11) однозначно разрешимы относительно  $x_{0,2}$  и  $x_{0,1}$  и функции (8), а значит, и само решение вне звуковых линий принадлежит классу  $C^k$ .

**Поведение решения на звуковых линиях.** Покажем, что градиенты всех величин терпят разрыв первого рода на звуковых линиях. Производные по  $t$  на звуковых линиях непрерывны. Здесь предполагается, что  $t > -1/r'_0(a_1) > 0$ .

Инвариант  $r = r(x, t) = r_0(x_{0,2})$  в области  $x > 0$  имеет класс  $C^k$ . В области  $0 < x < a_1$  инвариант  $l = l(x, t) = l_0(x_{0,1})$ , где  $x_{0,1}$  находится из уравнения (9), а в области II  $\left(x > a_1, t > -\frac{1}{r'_0(a_1)} > 0\right)$   $l = l(x, t) = r_0(x_{0,1})$ , где  $x_{0,1}$  находится из уравнения (10). Поэтому слева от звуковой линии  $x = a_1$  производная  $l_x = l'_0(x_{0,1}) \frac{\partial x_{0,1}}{\partial x} = \frac{l'_0(x_{0,1})}{1 + l'_0(x_{0,1})t}$ , а справа от нее  $l_x = r'_0(x_{0,1}) \frac{\partial x_{0,1}}{\partial x} = \frac{r'_0(x_{0,1})}{1 + r'_0(x_{0,1})t}$ . Согласно (3)  $l'_0(a_1) > 0 > r'_0(a_1)$  и, следовательно,  $\lim_{x \rightarrow a_1-0} l_x(x, t) \neq \lim_{x \rightarrow a_1+0} l_x(x, t)$ . Таким образом, скачок  $[l_x]_{x=a_1} \neq 0$ . Поскольку  $[r_x]_{x=a_1} = 0$ , то  $[u_x]_{x=a_1} \neq 0$  и  $[c_x]_{x=a_1} \neq 0$ , а следовательно, градиенты плотности и давления также имеют разрывы первого рода на линии  $x = a_1$ .

**Поведение градиентов на линии вакуума.** Найдем частные производные по  $x$  функций  $u = u(x, t)$  и  $c = c(x, t)$  при  $t = t_0 > -1/r'_0(a_1) > 0$  в окрестности линии вакуума  $\gamma_+$ , лежащей под

асимптотой этой линии. В данной окрестности  $r = r(x, t) = u + c = r_0(x_{0,2}) = r_2$ ,  $l = l(x, t) = u - c = r_0(x_{0,1}) = r_1$ , где  $x_{0,2} = x_{0,2}(x, t)$ ,  $x_{0,1} = x_{0,1}(x, t)$  — решения уравнений (10). Следовательно, при  $t = t_0$

$$r_x = r'_2 \frac{\partial x_{0,2}}{\partial x}, \quad l_x = r'_1 \frac{\partial x_{0,1}}{\partial x}, \quad \frac{\partial x_{0,i}}{\partial x} = \frac{1}{1 + r'_i t_0}, \quad r'_i \equiv r'_0(x_{0,i}), \quad i = 1, 2. \quad (12)$$

Прямые, определяемые уравнениями (10) при фиксированных  $x_{0,2}$  и  $x_{0,1}$ , касаются огибающей  $\gamma_+$  в точках  $(x_2, t_2)$  и  $(x_1, t_1)$  таких, что  $1 + r'_i t_i = 1 + r'_0(x_{0,i}) t_i = 0$ ,  $i = 1, 2$ . Поэтому  $r'_i = -1/t_i$  и  $\frac{\partial x_{0,i}}{\partial x} = \frac{t_i}{t_i - t_0}$ ,  $i = 1, 2$ . Подставляя последние выражения в формулы (12), получаем

$$\begin{aligned} r_x &= -\frac{1}{t_2 - t_0} < 0; \quad l_x = -\frac{1}{t_1 - t_0} > 0; \\ u_x &= -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{t_1 - t_0} + \frac{1}{t_2 - t_0} \right); \quad c_x = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{t_1 - t_0} - \frac{1}{t_2 - t_0} \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Так как  $x_{0,2} < x_{0,1}$ , то  $t_1 < t_0 < t_2$ .

Найдем выражение для произведения  $cc_x$ , аналогичное (13). Пусть  $x = \varphi(t)$  — уравнение огибающей  $\gamma_+$ . Тогда координаты точки  $(x, t_0)$  связаны с  $t_1$  и  $t_2$  соотношениями  $x = x_{0,2} + \varphi'(t_2) t_0$  и  $x = x_{0,1} + \varphi'(t_1) t_0$ . Поэтому  $r_2 - r_1 = r'(\xi)(x_{0,2} - x_{0,1}) = r'(\xi)(\varphi'(t_1) - \varphi'(t_2)) t_0 = r'(\xi) \varphi''(\tau) t_0 \times (t_1 - t_2)$ ,  $x_{0,2} < \xi < x_{0,1}$ ,  $t_1 < \tau < t_2$ . Из (13) и предыдущего равенства получаем

$$cc_x = \frac{1}{2} (r_2 - r_1) c_x = \frac{1}{4} r'(\xi) \varphi''(\tau) t_0 \left( 2 - \frac{t_2 - t_0}{t_1 - t_0} - \frac{t_1 - t_0}{t_2 - t_0} \right). \quad (14)$$

Когда точка  $(x, t_0)$  стремится к точке, лежащей на  $\gamma_+$ , очевидно,  $(t_1 - t_0) \rightarrow -0$ ,  $(t_2 - t_0) \rightarrow +0$ . Поэтому из (13) следует, что  $\lim_{(x, t_0) \rightarrow \gamma_+} r_x = -\infty$ ,  $\lim_{(x, t_0) \rightarrow \gamma_+} l_x = +\infty$ ,  $\lim_{(x, t_0) \rightarrow \gamma_+} c_x = -\infty$ . Для вычисления аналогичных пределов производной  $u_x$  и произведения  $cc_x$  требуется более подробное рассмотрение.

Пусть огибающая  $\gamma_+$  является кривой класса  $C^4$ , т. е. в ее уравнении  $x = \varphi(t)$  функция  $\varphi \in C^4$ . Для упрощения выкладок при оценке выражений, содержащихся в скобках в формулах (13) и (14), изменим начало отсчета времени таким образом, чтобы  $t_0 = 0$ , оставив без изменения уравнение кривой  $\gamma_+$ . В этом случае

$$\varphi(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + O(t^4), \quad a_i = \frac{\varphi^{(i)}(0)}{i!}, \quad i = 1, 2, 3; \quad a_j > 0, \quad j = 0, 1, 2$$

и уравнение  $x_i - x = \varphi'(t_i) t_i$ ,  $x_i = \varphi(t_i)$ ,  $i = 1, 2$ , для точек касания  $C_+$ -характеристик, проходящих через точку  $(x, 0)$ , с кривой  $\gamma_+$  легко приводится к виду  $a_0 - x = t_i^2 (a_2 + 2a_3 t_i + O(t_i^2))$ . Отсюда получаем

$$t_i = (-1)^i \sqrt{\frac{a_0 - x}{a_2 + 2a_3 t_i + O(t_i^2)}}, \quad i = 1, 2. \quad (15)$$

Следовательно, поскольку  $\lim_{\substack{(x,0) \rightarrow \gamma_+ \\ (x \rightarrow a_0)}} t_i = 0$ , то  $\lim_{(x,0) \rightarrow \gamma_+} \frac{t_2}{t_1} = -1$ . Возвращаясь к прежнему началу

отсчета времени, находим  $\lim_{(x,0) \rightarrow \gamma_+} \frac{t_2 - t_0}{t_1 - t_0} = -1$ , и в силу формулы (14)  $\lim_{(x,t_0) \rightarrow \gamma_+} cc_x = r'_0(x_0) \varphi''(t_0) t_0$ ,

$x_0 = \varphi(t_0) - \varphi'(t_0) t_0$ . Из параметрических уравнений огибающей  $x = x_0 + r_0(x_0) t$ ,  $t = -\frac{1}{r'_0(x_0)}$

следует, что  $\varphi''(t_0) = \frac{(r'_0(x_0))^3}{r''_0(x_0)}$ . Кроме того,  $1 + r'_0(x_0) t_0 = 0$ . Поэтому

$$\lim_{(x,t_0) \rightarrow \gamma_+} cc_x = -\varphi''(t_0) = -\frac{(r'_0(x_0))^3}{r''_0(x_0)}. \quad (16)$$

Из (13) и (15) следует также, что  $\lim_{(x,t_0) \rightarrow \gamma_+} \left( \frac{1}{t_1 - t_0} + \frac{1}{t_2 - t_0} \right) = \frac{2a_3}{a_2} = \frac{2\varphi'''(t_0)}{3\varphi''(t_0)}$ ,  $\lim_{(x,t_0) \rightarrow \gamma_+} u_x = -\frac{\varphi'''(t_0)}{3\varphi''(t_0)}$ . На линии вакуума ( $c = 0$ )  $\nabla p = 0$ : согласно (16)  $cc_x \neq \infty$ , следовательно,  $\lim_{(x,t_0) \rightarrow \gamma_+} p_x = \lim_{(x,t_0) \rightarrow \gamma_+} \frac{1}{\sqrt{3A}} c^2 c_x = 0$ .

### 3. Уравнения траекторий частиц газа

**Интеграл уравнения траекторий в дозвуковой области.** Рассмотрим траекторию  $x = x(t)$  произвольной частицы газа, расположенную в дозвуковой области, начинающуюся в точке  $x_0 = x(0)$  (рис. 2). Любая точка  $(x, t)$  этой траектории является точкой пересечения  $C_+$ -характеристики, начинающейся в некоторой точке  $x_{0,2}$ , и  $C_-$ -характеристики, начинающейся в точке  $x_{0,1}$ . При этом  $x_{0,2} < x_0 < x_{0,1}$  и вся траектория расположена в треугольнике, образованном характеристиками и осью абсцисс, поскольку никакая траектория не может пересекать одну характеристику в двух точках.

Координаты  $(x, t)$  точки траектории и параметры  $x_{0,2}$  и  $x_{0,1}$  связаны уравнениями характеристик

$$\begin{aligned} x &= x_{0,2} + r_2 t, & r_2 &= r_0(x_{0,2}); \\ x &= x_{0,1} + l_1 t, & l_1 &= l_0(x_{0,1}), \end{aligned} \quad (17)$$

из которых следует, что вдоль траектории

$$x = \frac{x_{0,1} r_2 - x_{0,2} l_1}{r_2 - l_1} \equiv x(x_{0,1}, x_{0,2}); \quad t = \frac{x_{0,1} - x_{0,2}}{r_2 - l_1} \equiv t(x_{0,1}, x_{0,2}) \quad (18)$$

выполняются равенства

$$dx = dx_{0,2} + r_2' dx_{0,2} t + r_2 dt; \quad dx = dx_{0,1} + l_1' dx_{0,1} t + l_1 dt. \quad (19)$$

На траектории  $x_{0,2} = \mu(x_{0,1})$ , и, следовательно, координаты  $x$  и  $t$  являются функциями одного из параметров:  $x_{0,1}$  или  $x_{0,2}$ . Из (19) находим

$$dx = \frac{\begin{vmatrix} (1 + r_2' t) dx_{0,2} & -r_2 \\ (1 + l_1' t) dx_{0,1} & -l_1 \end{vmatrix}}{r_2 - l_1}; \quad dt = \frac{\begin{vmatrix} 1 & (1 + r_2' t) dx_{0,2} \\ 1 & (1 + l_1' t) dx_{0,1} \end{vmatrix}}{r_2 - l_1}. \quad (20)$$

На траектории

$$\frac{dx}{dt} = u(x, t) = \frac{r + l}{2} = \frac{r_2 + l_1}{2}. \quad (21)$$

Подставляя (20) в (21), получаем уравнение

$$\frac{dx}{dt} = \frac{r_2 (1 + l_1' t) dx_{0,1} - l_1 (1 + r_2' t) dx_{0,2}}{(1 + l_1' t) dx_{0,1} - (1 + r_2' t) dx_{0,2}} = \frac{r_2 + l_1}{2}. \quad (22)$$

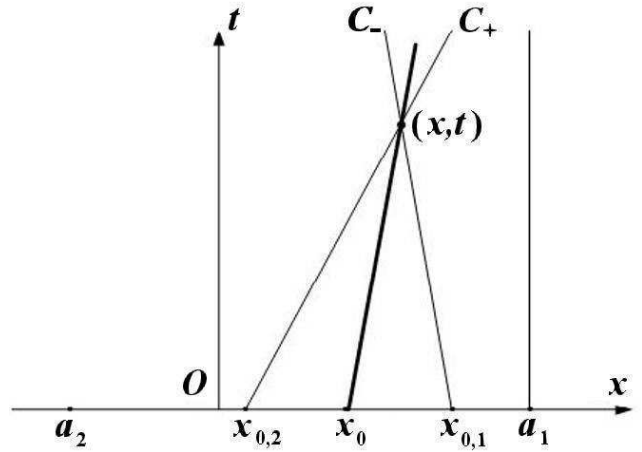


Рис. 2. Траектория (жирная линия), расположенная в дозвуковой области течения

Так как  $t$ ,  $r_2$ ,  $l_1$  являются функциями параметров  $x_{0,1}$  и  $x_{0,2}$ , уравнение (22) — это дифференциальное уравнение для функции  $x_{0,2} = \mu(x_{0,1})$ . Из (22) после элементарных преобразований находим  $(r_2 - l_1) \left[ (1 + l_1' t) dx_{0,1} + (1 + r_2' t) dx_{0,2} \right] = 0$ . Поскольку  $r_2 > 0 > l_1$ , то  $(1 + l_1' t) dx_{0,1} + (1 + r_2' t) dx_{0,2} = 0$ , или в другой форме

$$(dl_1 + dr_2)t + dx_{0,1} + dx_{0,2} = 0. \quad (23)$$

Заменяя в (23) функцию  $t$  ее выражением из (18), получаем

$$d(r_2 x_{0,1}) - d(l_1 x_{0,2}) + (r_2 - r_2' x_{0,2}) dx_{0,2} + (l_1' x_{0,1} - l_1) dx_{0,1} = 0.$$

Последнее соотношение, очевидно, можно переписать в виде полного дифференциала

$$d(r_2 x_{0,1}) - d(l_1 x_{0,2}) + d\left(\int_{x_0}^{x_{0,2}} (r_2 - r_2' \bar{x}_{0,2}) d\bar{x}_{0,2}\right) + d\left(\int_{x_0}^{x_{0,1}} (l_1' \bar{x}_{0,1} - l_1) d\bar{x}_{0,1}\right) = 0,$$

поскольку на фиксированной траектории  $x_0 = \text{const}$ .

Таким образом, показано, что уравнение траекторий в дозвуковой области имеет интеграл

$$r_2 x_{0,1} - l_1 x_{0,2} + \int_{x_0}^{x_{0,2}} (r_2 - r_2' \bar{x}_{0,2}) d\bar{x}_{0,2} + \int_{x_0}^{x_{0,1}} (l_1' \bar{x}_{0,1} - l_1) d\bar{x}_{0,1} = \text{const}_1. \quad (24)$$

Для начальной точки траектории  $(x_0, 0)$  параметры  $x_{0,2} = x_{0,1} = x_0$ . Поэтому в точке  $(x_0, 0)$  траектории интеграл (24) имеет следующее значение, которое определяет константу:  $\text{const}_1 = (r_0(x_0) - l_0(x_0))x_0$ . Отсюда получаем выражение для интеграла в дозвуковой области:

$$r_2 x_{0,1} - l_1 x_{0,2} + \int_{x_0}^{x_{0,2}} (r_2 - r_2' \bar{x}_{0,2}) d\bar{x}_{0,2} + \int_{x_0}^{x_{0,1}} (l_1' \bar{x}_{0,1} - l_1) d\bar{x}_{0,1} = (r_0(x_0) - l_0(x_0))x_0. \quad (25)$$

После подстановки в (25) функций  $x_{0,2} = x_{0,2}(x, t)$ ,  $x_{0,1} = x_{0,1}(x, t)$ , найденных из уравнений (17), получим неявное уравнение траектории, начинающейся в точке  $(x_0, 0)$ .

**Физический смысл интеграла уравнения траекторий в дозвуковой области.** Учитывая, что  $r - l = 2c = 2\sqrt{3A}\rho$ , перепишем интеграл (25) в виде

$$\begin{aligned} & r_2 x_{0,1} - l_1 x_{0,2} + \int_0^{x_{0,2}} (r_2 - r_2' \bar{x}_{0,2}) d\bar{x}_{0,2} + \int_0^{x_{0,1}} (l_1' \bar{x}_{0,1} - l_1) d\bar{x}_{0,1} = \\ & = 2\sqrt{3A}\rho(x_0)x_0 + \int_0^{x_0} [r_0 - l_0 - (r_0' - l_0')x] dx, \quad r_0 = r_0(x), \quad l_0 = l_0(x). \end{aligned}$$

Отсюда, интегрируя справа по частям, получаем

$$r_2 x_{0,1} - l_1 x_{0,2} + \int_0^{x_{0,2}} (r_0 - r_0' x) dx + \int_0^{x_{0,1}} (l_0' x - l_0) dx = 4\sqrt{3A}m(x_0), \quad (26)$$

где  $m(x_0) = \int_0^{x_0} \rho_0(x) dx$  — масса газа, содержащегося в области  $(0, x_0)$ .

Таким образом, найденный интеграл уравнения траекторий выражает закон сохранения массы газа, заключенного между двумя траекториями, начинающимися в точках  $(0, 0)$  и  $(x_0, 0)$ .

Интеграл (26) допускает очевидное упрощение. Интегрируя в (26) по частям, находим окончательное выражение для интеграла уравнения траекторий в дозвуковой области:

$$(r_2 + l_1)(x_{0,1} - x_{0,2}) + 2 \int_0^{x_{0,2}} r_0(x) dx - 2 \int_0^{x_{0,1}} l_0(x) dx = 4\sqrt{3}Am(x_0). \quad (27)$$

**Интеграл уравнения траекторий в сверхзвуковой области.** Теперь рассмотрим траекторию  $x = x(t)$  частицы газа, расположенную в сверхзвуковой области, начинающуюся в точке  $(a_1, t_0)$  звуковой линии:  $x(t_0) = a_1$  (рис. 3). Любая точка  $(x, t)$  этой траектории является точкой пересечения пары  $C_+$ -характеристик, начинающихся в точках  $x_{0,2}$  и  $x_{0,1}$ . При этом, как и прежде,  $x_{0,2} < x_{0,1}$  и вся траектория расположена в треугольнике, образованном характеристиками и звуковой линией  $x = a_1$ .

Координаты  $(x, t)$  точки траектории и параметры  $x_{0,2}$  и  $x_{0,1}$  связаны уравнениями двух  $C_+$ -характеристик:

$$\begin{aligned} x &= x_{0,2} + r_2 t, & r_2 &= r_0(x_{0,2}); \\ x &= x_{0,1} + r_1 t, & r_1 &= r_0(x_{0,1}), \end{aligned} \quad (28)$$

из которых следует, что вдоль траектории  $x = \frac{x_{0,1}r_2 - x_{0,2}r_1}{r_2 - r_1} \equiv x(x_{0,1}, x_{0,2})$ ,  $t = \frac{x_{0,1} - x_{0,2}}{r_2 - r_1} \equiv t(x_{0,1}, x_{0,2})$ . Вдоль траектории  $x_{0,2} = \mu(x_{0,1})$ , и, следовательно, координаты  $x$  и  $t$  являются функциями одного из параметров:  $x_{0,1}$  или  $x_{0,2}$ . На траектории

$$\frac{dx}{dt} = u(x, t) = \frac{r + l}{2} = \frac{r_2 + r_1}{2}, \quad (29)$$

так как в этом случае  $l = l(x, t) = r_1$ .

Формулы (28), (29) получаются из формул (17), (18) и (21) для дозвуковой области, если в последних  $l_1$  заменить на  $r_1$ . Кроме того, для точки  $(x, t)$ , не лежащей на оси абсцисс,  $r_2 > r_1$ . Поэтому все выкладки для дозвуковой области, предшествующие определению константы в интеграле (24), справедливы и для сверхзвуковой области. Следовательно, в сверхзвуковой области имеет место аналог интеграла (24), получающийся из (24) заменой  $l_1$  на  $r_1$ :

$$r_2 x_{0,1} - r_1 x_{0,2} + \int_{x_0}^{x_{0,1}} (r'_1 \bar{x}_{0,1} - r_1) d\bar{x}_{0,1} + \int_{x_0}^{x_{0,2}} (r_2 - r'_2 \bar{x}_{0,2}) d\bar{x}_{0,2} = \text{const}_2.$$

В данном случае два интеграла можно объединить в один:

$$r_2 x_{0,1} - r_1 x_{0,2} + \int_{x_{0,2}}^{x_{0,1}} (r'_1 \bar{x}_{0,1} - r_1) d\bar{x}_{0,1} = \text{const}_2. \quad (30)$$

Интегрируя в (30) по частям, получаем

$$(r_2 + r_1)(x_{0,1} - x_{0,2}) - 2 \int_{x_{0,2}}^{x_{0,1}} r_0(x) dx = \text{const}_2. \quad (31)$$

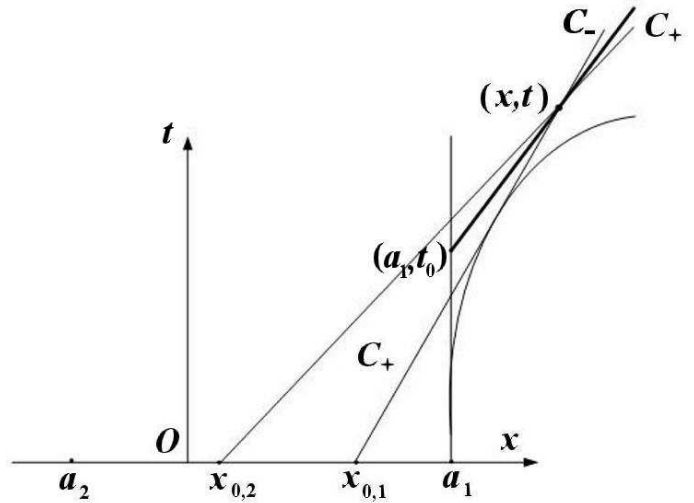


Рис. 3. Траектория (жирная линия), расположенная в сверхзвуковой области течения

Заметим, что левая часть интеграла (31) формально получается из левой части интеграла (27) для дозвуковой области, если в (27) положить  $l_0(x) = r_0(x)$  (в полном соответствии с тем, что  $l$ -инвариант в сверхзвуковой области равен  $r$ -инварианту в точке  $x_{0,1}$ ).

Найдем константу в интеграле (31). Полагать  $t = 0$ , считая  $x_{0,2} = x_{0,1}$ , в данном случае нельзя, поскольку в сверхзвуковой области  $t > t_k = -1/r'_0(a_1) > 0$ . Начальная точка траектории  $(a_1, t_0)$ ,  $t_0 > 0$ , является пересечением  $C_+$ -характеристики, выходящей из точки  $(x_{0,2}, 0)$ , и звуковой линии ( $C_+$ -характеристики)  $x = a_1$ . Поэтому  $a_1 = x_{0,1} = x_{0,2} + r_2 t_0$  и для точки  $(a_1, t_0)$   $x_{0,1} - x_{0,2} = a_1 - x_{0,2}$ ;  $r_2 = (a_1 - x_{0,2})/t_0$ ;  $r_1 = r_0(a_1) = 0$ . Следовательно, значение интеграла (31) в точке  $(a_1, t_0)$

$$\frac{(a_1 - x_{0,2})^2}{t_0} - 2 \int_{x_{0,2}}^{a_1} r_0(x) dx = \text{const}_2. \quad (32)$$

Пусть  $x_2(a_1, t_0)$  — решение уравнения  $a_1 = x_{0,2} + r_2 t_0$ ,  $r_2 = r_0(x_{0,2})$  относительно  $x_{0,2}$  при заданном  $t_0$ . Тогда согласно (32)  $\text{const}_2 = \frac{(a_1 - x_2(a_1, t_0))^2}{t_0} - 2 \int_{x_2(a_1, t_0)}^{a_1} r_0(x) dx$ . В результате приходим к окончательному выражению для интеграла уравнения траекторий в сверхзвуковой области:

$$(r_2 + r_1)(x_{0,1} - x_{0,2}) - 2 \int_{x_{0,2}}^{x_{0,1}} r_0(x) dx = \frac{(a_1 - x_2(a_1, t_0))^2}{t_0} - 2 \int_{x_2(a_1, t_0)}^{a_1} r_0(x) dx, \quad r_2 = r_0(x_{0,2}), \quad r_1 = r_0(x_{0,1}). \quad (33)$$

После подстановки в (33) функций  $x_{0,2} = x_{0,2}(x, t)$ ,  $x_{0,1} = x_{0,1}(x, t)$ , найденных из уравнений (28), получим неявное уравнение траектории, начинающейся в точке  $(a_1, t_0)$ .

**"Сшивка" интегралов уравнений траекторий в дозвуковой и сверхзвуковой областях.** Чтобы "сшить" интеграл (27) для дозвуковой области с интегралом (33) для сверхзвуковой области, необходимо привести левые части этих интегралов к одному виду. Прибавляя к обеим частям интеграла (27) величину  $-2 \int_0^{x_{0,1}} r_0(x) dx$  и учитывая, что  $r_0(x) - l_0(x) = 2c_0(x) = 2\sqrt{3A}\rho_0(x)$ , получаем

$$(r_2 + l_1)(x_{0,1} - x_{0,2}) - 2 \int_{x_{0,2}}^{x_{0,1}} r_0(x) dx = 4\sqrt{3A} \left( m(x_0) - m(x_{0,1}) \right), \quad r_2 = r_0(x_{0,2}), \quad l_1 = l_0(x_{0,1}), \quad (34)$$

где  $m(x_0) = \int_0^{x_0} \rho_0(x) dx$  и  $m(x_{0,1}) = \int_0^{x_{0,1}} \rho_0(x) dx$  — массы газа, содержащегося в областях  $(0, x_0)$  и  $(0, x_{0,1})$  соответственно.

Сравним интеграл (34) с интегралом (33) для сверхзвуковой области. В интеграле (33) инвариант  $r_1$  играет ту же роль, что инвариант  $l_1$  в интеграле (34), — это значение  $l$ -инварианта в точке  $(x, t)$  траектории. Следовательно, левые части интегралов (34) и (33) "совпадают" по существу. Для одной траектории, переходящей из дозвуковой области в сверхзвуковую, интегралы (34) и (33) должны принимать одно значение в точке пересечения данной траектории со звуковой линией. То есть эти интегралы должны совпадать при  $x_{0,1} = a_1$ , при этом параметр  $x_{0,2}$  у них один и тот же. Значит, правая часть (константа) "сверхзвукового" интеграла (33) равна  $4\sqrt{3A} \left( m(x_0) - m(a_1) \right)$ , где  $m(a_1) = \int_0^{a_1} \rho_0(x) dx$  — полная масса газа, содержащегося в области  $(0, a_1)$ .

**Физический смысл интеграла уравнения траекторий в сверхзвуковой области и продолжение траектории из дозвуковой области в сверхзвуковую.** Таким образом, инте-

грал (33) уравнения траекторий в сверхзвуковой области приведен к виду

$$(r_2 + r_1)(x_{0,1} - x_{0,2}) - 2 \int_{x_{0,2}}^{x_{0,1}} r_0(x) dx = 4\sqrt{3A} \left( m(x_0) - m(a_1) \right), \quad (35)$$

проясняющему его физический смысл: этот интеграл выражает закон сохранения массы газа, заключенного между двумя траекториями, — траекторией, начинающейся в точке  $(x_0, 0)$  и проходящей через точку  $(a_1, t_0)$ , и линией вакуума. При этом  $m(x_0, a_1) \equiv m(a_1) - m(x_0)$  — масса газа, содержащегося в области  $x_0 < x < a_1$ . При заданном значении  $x_0$  интеграл (35) в неявном виде задает в сверхзвуковой области уравнение траектории, которая является продолжением траектории, начинающейся в точке  $x_0$  дозвуковой области и описываемой интегралом (27).

#### 4. Пример

Здесь подробно исследовано течение частного вида, принадлежащее описанному общему классу.

**Постановка задачи.** Идеальный газ подчиняется уравнению состояния

$$p = \frac{\rho^3}{3}, \quad (36)$$

при  $t=0$  заполняет плоский слой  $-1 \leq x \leq 1$ ; его начальное состояние задано соотношениями

$$u(x, 0) = 0; \quad \rho(x, 0) = 1 - x^2; \quad -1 \leq x \leq +1. \quad (37)$$

**Характер возникающего течения.** На плоскости  $R^2(x, t)$  область определения течения разбивается на три части: в области  $|x| < 1$  течение дозвуковое, в областях  $|x| > 1$  — сверхзвуковое. Прямые  $x = \pm 1$  являются звуковыми линиями. Картина течения симметрична относительно координатных осей:

$$\rho(-x, t) \equiv \rho(x, t); \quad u(-x, t) \equiv -u(x, t); \quad \rho(x, -t) \equiv \rho(x, t); \quad u(x, -t) \equiv -u(x, t); \quad x \geq 0; \quad t \geq 0. \quad (38)$$

Кривые градиентных катастроф имеют уравнения

$$x = \pm \left( \frac{1}{4t} + t \right), \quad |t| \geq \frac{1}{2}. \quad (39)$$

Линии вакуума являются объединениями отрезков прямых  $x = \pm 1$ ,  $|t| \leq 1/2$  с кривыми (39).

**Решение задачи.** В обозначениях  $P = \sqrt{1 - 2xw + w^2}$ ;  $Q = \sqrt{1 + 2xw + w^2}$ ;  $w = 2t$  решение задачи (1), (36), (37) для положительных  $x$  и  $t$  имеет следующий аналитический вид:

– в дозвуковой области для  $0 < x \leq 1$ ,  $t > 0$

$$\rho(x, t) = \frac{1}{w^2} (P + Q - 2); \quad u(x, t) = \frac{1}{w^2} (P - Q + 2xw); \quad (40)$$

– в сверхзвуковой области для  $1 \leq x \leq \frac{1}{4t} + t$ ,  $t \geq \frac{1}{2}$

$$\rho(x, t) = \frac{2}{w^2} P; \quad u(x, t) = \frac{2}{w^2} (xw - 1). \quad (41)$$



Верхняя часть области определения течения, описываемого формулами (40), (41) и (38), и поведение характеристик в полуплоскости  $R^2(x, t)$ ,  $t > 0$  представлены на рис. 1, поведение плотности и скорости — на рис. 4, 5.

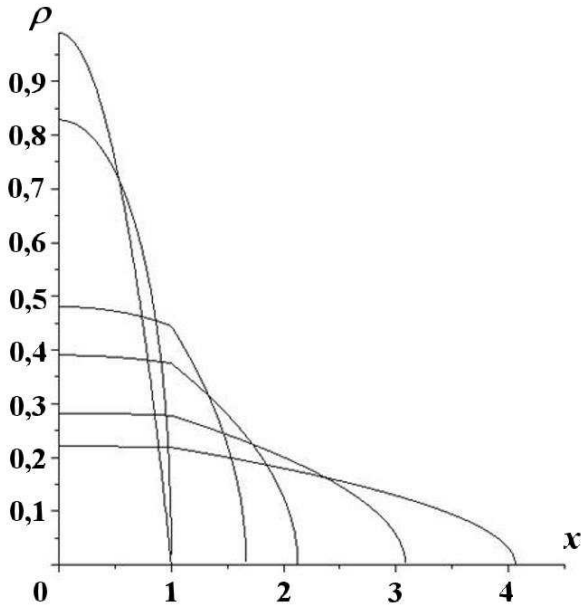


Рис. 4. Графики плотности на моменты времени  $t = 0,1; 0,5; 1,5; 2; 3; 4$

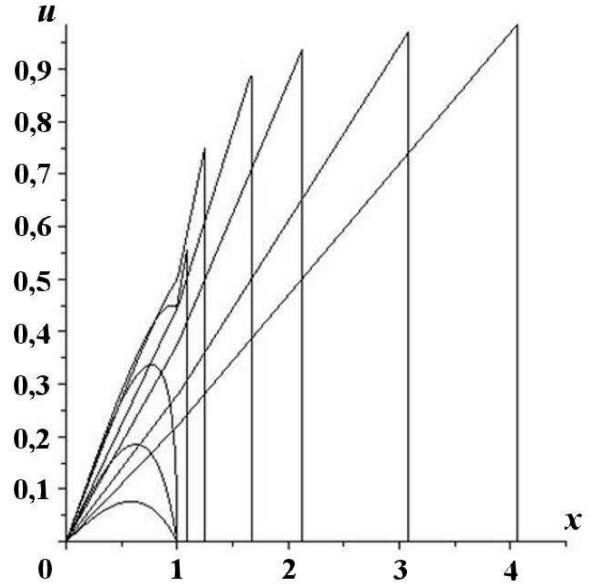


Рис. 5. Графики скорости на моменты времени  $t = 0,1; 0,25; 0,5; 0,75; 1,0; 1,5; 2; 3; 4$

**Уравнения траекторий частиц газа.** В дозвуковой области траектории частиц газа определяются из уравнения

$$\frac{dx}{dt} = u(x, t) = \frac{1}{w^2} (P - Q + 2xw). \quad (42)$$

Одна траектория в дозвуковой области заранее известна — это очевидная траектория  $x = x(t) \equiv 0$ . Следовательно, интеграл массы для уравнения (42) записывается в виде

$$m(t) = \int_0^{x(t)} \rho(x, t) dx = m(x_0) = \int_0^{x_0} \rho(x, 0) dx = x_0 - \frac{x_0^3}{3} = \text{const}(x_0), \quad 0 < x_0 < 1, \quad (43)$$

где  $x = x(t)$  — траектория, выходящая из точки  $(x_0, 0)$  оси  $Ox$ . Подставляя (40) в (43) и вычисляя интеграл, получаем неявное уравнение для траектории  $x = x(t)$ ,  $x(0) = x_0$ :

$$\frac{1}{3w^3} \left[ (1 + 2xw + w^2)^{3/2} - (1 - 2xw + w^2)^{3/2} \right] - \frac{2x}{w^2} = x_0 - \frac{x_0^3}{3}. \quad (44)$$

В сверхзвуковой области траектории находятся интегрированием линейного уравнения  $\frac{dx}{dt} = u(x, t) = \frac{2}{w^2} (xw - 1)$ . Траектория, выходящая из точки  $(1, w_0)$  звуковой линии, имеет уравнение

$$x \equiv x(w) = \frac{1}{2w} + \left( \frac{1}{w_0} - \frac{1}{2w_0^2} \right) w, \quad x(w_0) = 1, \quad w_0 \geq 1. \quad (45)$$

При  $w_0 = 1$  из (45) получаем уравнение правой границы течения при  $t \geq 0,5$  — линии вакуума  $x \equiv x(w) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{w} + w \right)$ .

Продолжение траектории (44) в сверхзвуковую область задается уравнением (45) с параметром

$$w_0 = \frac{1}{1 + \sqrt[3]{\frac{3x_0 - x_0^3}{2} - 1}}. \quad (46)$$

**Интегральные величины течения.** Масса  $m^+$  и полная энергия  $E^+$  газа, расположенного в области  $x \geq 0$ , определяются формулами

$$m^+ = \int_0^1 \rho(x, 0) dx = \int_0^1 (1 - x^2) dx = \frac{2}{3} = \text{const};$$

$$E^+ = \int_0^1 \left( \frac{1}{2} \rho u^2 + \rho \varepsilon \right) \Big|_{t=0} dx = \int_0^1 \frac{1}{2} p \Big|_{t=0} dx = \frac{1}{6} \int_0^1 (1 - x^2)^3 dx = \frac{8}{105} = \text{const}.$$

Функция  $I^+(t)$ , задающая импульс массы газа, расположенного в области  $x \geq 0$ , в зависимости от времени  $t$  равна  $I^+(t) = \int_0^t p(0, \tilde{t}) d\tilde{t}$ . Согласно формулам (36) и (40)  $p(0, t) = \frac{1}{3} (\rho(0, t))^3 = \frac{8}{3w^6} (\sqrt{1+w^2} - 1)^3 = \frac{8}{3} \frac{1}{(\sqrt{1+w^2} + 1)^3}$ . Поэтому

$$I^+(t) \equiv I^+(w) = \frac{4}{15w^5} [5w^2 + 4 + (w^2 - 4)(1 + w^2)^{3/2}]. \quad (47)$$

Формула (47), очевидно, справедлива и для отрицательного времени ( $w < 0$ ).

**Интегралы уравнения траекторий.** Интеграл (27) уравнения траекторий в дозвуковой области в случае уравнения состояния (36) и начальных данных (37) принимает вид ( $A = 1/3$ )

$$\frac{1}{3} (x_{0,1} + x_{0,2}) (x_{0,1}^2 - 4x_{0,1}x_{0,2} + x_{0,2}^2 + 6) = 4m(x_0). \quad (48)$$

Для дозвуковой области

$$x_{0,2} = \frac{1 - \sqrt{1 - 2xw + w^2}}{w}; \quad x_{0,1} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2xw + w^2}}{w}. \quad (49)$$

Подставив выражения (49) в левую часть (48), после некоторых преобразований получим, как и полагается, учетверенную левую часть уравнения траекторий (44).

В сверхзвуковой области интеграл (33) в форме (35) уравнения траекторий в случае уравнения состояния (36) и начальных данных (37) принимает простой вид ( $A = 1/3; a_1 = 1$ )

$$\frac{(x_{0,2} - x_{0,1})^3}{3} = 4(m(x_0) - m(1)), \quad (50)$$

где  $m(x_0, 1) \equiv m(1) - m(x_0)$  — масса газа, заключенного в области  $x_0 < x < 1$  (между траекторией и линией вакуума). Для сверхзвуковой области

$$x_{0,2} = \frac{1 - \sqrt{1 - 2xw + w^2}}{w}; \quad x_{0,1} = \frac{1 + \sqrt{1 - 2xw + w^2}}{w}. \quad (51)$$

Подставив выражения (51) в левую часть (50), получим уравнение траектории в форме

$$-\frac{8}{3\omega^3} (1 - 2xw + w^2)^{3/2} = 4(m(x_0) - m(1)),$$

означающей, что  $m(x_0, 1) = \frac{2}{3w^3} (1 - 2xw + w^2)^{3/2}$ . То же самое следует из (41):  $m(t) = m(x_0, 1) = \int_{x(t)}^{xb} \rho(x, t) dx = \frac{2}{w^2} \int_{x(t)}^{xb} P dx = \frac{2}{3w^3} (1 - 2xw + w^2)^{3/2}$ , поскольку при  $w > 1$  на линии вакуума  $1 - 2xw + w^2 = 0$ .

**Замечание о характере траекторий в сверхзвуковой области.** Согласно (50) в сверхзвуковой области каждая точка движется таким образом, что разность соответствующих ей параметров  $x_{0,1}$  и  $x_{0,2}$  остается постоянной:  $x_{0,1} - x_{0,2} = \sqrt[3]{12(m(1) - m(x_0))} = \text{const}$ . В силу (28) на траектории выполнено также равенство

$$\left( r_0(x_{0,2}) - r_0(x_{0,1}) \right) t = x_{0,1} - x_{0,2} = \text{const}. \quad (52)$$

Чтобы найти константу в соотношении (52) для траектории, проходящей через точку  $(1, w_0)$  звуковой линии (при этом параметры  $w_0$  и  $x_0$  связаны соотношением (46)), подставим выражение (45) для координаты  $x$  на траектории как функции времени  $t$  в выражения (51) для параметров  $x_{0,1}$ ,  $x_{0,2}$ . В результате получим, что на этой траектории

$$\begin{aligned} x_{0,1} &= \frac{1}{w} - \frac{1}{w_0} + 1; & x_{0,2} &= \frac{1}{w} + \frac{1}{w_0} - 1; & \text{const} &= 2 \left( 1 - \frac{1}{w_0} \right); \\ \rho(x, t) = c(x, t) &= \frac{r_0(x_{0,2}) - r_0(x_{0,1})}{2} = \frac{2}{w} \left( 1 - \frac{1}{w_0} \right); \\ \lim_{t \rightarrow \infty} x_{0,1} &= - \lim_{t \rightarrow \infty} x_{0,2} = 1 - \frac{1}{w_0}; & \lim_{t \rightarrow \infty} r_0(x_{0,1}) &= 1 - \left( \lim_{t \rightarrow \infty} x_{0,1} \right)^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} r_0(x_{0,2}) = \frac{2}{w_0} - \frac{1}{w_0^2}. \end{aligned} \quad (53)$$

Из (45) для предельного значения скорости на траектории, проходящей через точку  $(1, w_0)$ , получаем выражение  $\lim_{t \rightarrow \infty} u = \frac{2}{w_0} - \frac{1}{w_0^2}$ , совпадающее с предельными значениями (53) инвариантов  $r_0(x_{0,1})$  и  $r_0(x_{0,2})$ .

**Разложение функций  $\rho \equiv \rho(x, t)$  и  $u \equiv u(x, t)$  в ряды Тейлора по переменной  $t$ .** Представим функции  $\rho \equiv \rho(x, t)$  и  $u \equiv u(x, t)$ , дающие решение задачи (1), (36), (37) на отрезке  $-1 \leq x \leq 1$  при  $t < 0,5$ , в виде рядов Тейлора по переменной  $t$ :

$$\rho(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\rho_{nt}^0}{n!} t^n; \quad u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u_{nt}^0}{n!} t^n; \quad \rho_{nt}^0 \equiv \rho_{nt}(x, 0), \quad u_{nt}^0 \equiv u_{nt}(x, 0), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (54)$$

Коэффициенты рядов определяются через выводящие производные

$$\rho_{nt} \equiv \rho_{nt}(x, t) \equiv \frac{\partial^n \rho(x, t)}{\partial t^n}, \quad u_{nt} \equiv u_{nt}(x, t) \equiv \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial t^n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (55)$$

функций  $\rho$  и  $u$  на начальном многообразии  $\{t = 0\}$ . Выводящие производные находятся в силу системы уравнений (1) и начальных условий (37).

Сначала найдем аналитические выражения производных (55) через производные  $\rho_{kx} \equiv \rho_{kx}(x, t) \equiv \frac{\partial^k \rho(x, t)}{\partial x^k}$ ,  $u_{kx} \equiv u_{kx}(x, t) \equiv \frac{\partial^k u(x, t)}{\partial x^k}$ ,  $k = 0, 1, 2, 3, \dots$ , в силу уравнений (1), т. е. через внутренние координаты на бесконечном продолжении системы (1). С целью упрощения необходимых для этого преобразований используем систему уравнений (4) в инвариантах Римана в матричном виде:  $\rho_t^* =$

$$= J \rho_x^*, \quad \rho^* \equiv \begin{pmatrix} r \\ \ell \end{pmatrix}, \quad J = - \begin{pmatrix} r & 0 \\ 0 & \ell \end{pmatrix}. \quad \text{По индукции доказывается формула}$$

$$\rho_{nt}^* = (J^n \rho_x^*)_{(n-1)x}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (56)$$

Так как  $J^n \rho_x^* = (-1)^n \begin{pmatrix} r^n r_x \\ \ell^n \ell_x \end{pmatrix} = \frac{(-1)^n}{n+1} \begin{pmatrix} (r^{n+1})_x \\ (\ell^{n+1})_x \end{pmatrix}$ , то равенство (56) можно переписать в виде  $\begin{pmatrix} r_{nt} \\ \ell_{nt} \end{pmatrix} \equiv \rho_{nt}^* = \frac{(-1)^n}{n+1} \begin{pmatrix} r^{n+1} \\ \ell^{n+1} \end{pmatrix}_{nx}$ . Поскольку  $\tilde{\rho} \equiv \begin{pmatrix} \rho \\ u \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ l \end{pmatrix}$ , то из предыдущего равенства получаем выражение для  $\tilde{\rho}_{nt}$  через производные по  $x$ :

$$\tilde{\rho}_{nt} \equiv \begin{pmatrix} \rho_{nt} \\ u_{nt} \end{pmatrix} = \frac{(-1)^n}{2(n+1)} \begin{pmatrix} r^{n+1} - l^{n+1} \\ r^{n+1} + l^{n+1} \end{pmatrix}_{nx}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (57)$$

В силу (37) для начальных значений величин  $r^{n+1}$  и  $l^{n+1}$  имеем равенства  $r^{n+1}(x, 0) = (1 - x^2)^{n+1}$ ,  $l^{n+1}(x, 0) = (-1)^{n+1} r^{n+1}(x, 0)$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Поэтому согласно формуле (57)

$$\rho_{nt}^0 \equiv \rho_{nt}(x, 0) = \begin{cases} 0 & \text{при } n \text{ нечетном;} \\ \frac{1}{n+1} [(1-x^2)^{n+1}]_{nx} & \text{при } n \text{ четном.} \end{cases} \quad (58)$$

Очевидно,  $\int_{-1}^x [(1-x^2)^{n+1}]_{(n+1)x} dx = \frac{d^n}{dx^n} [(1-x)^{n+1} (1+x)^{n+1}] \Big|_{-1}^x = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{d^k}{dx^k} (1-x)^{n+1} \times \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}} (1+x)^{n+1} = [(1-x^2)^{n+1}]_{nx}$ . Следовательно,

$$[(1-x^2)^{n+1}]_{nx} = \int_{-1}^x [(1-x^2)^{n+1}]_{(n+1)x} dx = (-1)^{n+1} \cdot 2^{n+1} (n+1)! \int_{-1}^x P_{n+1}(x) dx. \quad (59)$$

Здесь  $P_{n+1}(x)$  — стандартизованный полином Лежандра степени  $n+1$  [7, 8]:  $P_{n+1}(x) = \frac{1}{2^{n+1}(n+1)!} \times \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} (x^2 - 1)^{n+1}$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Из (58), (59) получаем

$$\rho_{nt}^0 = \begin{cases} 0 & \text{при } n \text{ нечетном;} \\ -2^{n+1} n! \int_{-1}^x P_{n+1}(x) dx & \text{при } n \text{ четном.} \end{cases} \quad (60)$$

В силу (60) ряд (54) для функции плотности принимает следующий вид:

$$\rho(x, t) = -2 \sum_{k=0}^{\infty} (2t)^{2k} \int_{-1}^x P_{2k+1}(x) dx. \quad (61)$$

Ряд (61) суммированием легко приводится к выражению (40). При  $-1 \leq x \leq 1$   $|P_n(x)| \leq 1$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  ([8], с. 128) и функциональный ряд  $R(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} (2t)^{2k} P_{2k+1}(x)$  мажорируется рядом  $R(t) = \sum_{k=0}^{\infty} |2t|^{2k}$ . Следовательно, для любого фиксированного  $t$ :  $|w| \equiv |2t| < 1$  ряд  $R(x, t)$  равномерно сходится на отрезке  $-1 \leq x \leq 1$  и допускает почленное интегрирование на любом отрезке  $[-1, x]$ ,  $-1 \leq x \leq 1$ . В силу этого равенство (61) можно переписать в виде

$$\rho(x, t) = -2 \int_{-1}^x \left[ \sum_{k=0}^{\infty} (2t)^{2k} P_{2k+1}(x) \right] dx, \quad -1 \leq x \leq 1, \quad -\frac{1}{2} < t < \frac{1}{2}. \quad (62)$$

Пусть  $A$  — производящая функция для многочленов Лежандра ([7], с. 324; [8], с. 120):  $A \equiv A(x, w) \equiv \frac{1}{\sqrt{1-2xw+w^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) w^n$ ,  $|x| \leq 1$ ,  $|w| < 1$ . Положим  $B \equiv B(x, w) \equiv \frac{1}{\sqrt{1+2xw+w^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) (-w)^n$ ,  $|x| \leq 1$ ,  $|w| < 1$ . Тогда, очевидно,  $\sum_{k=0}^{\infty} w^{2k} P_{2k+1}(x) = \frac{A-B}{2w}$ ,  $w \neq 0$ ,  $|w| < 1$ ,  $|x| \leq 1$  и из формулы (62) при  $w \neq 0$  получаем выражение (40) для плотности  $\rho(x, t)$  в дозвуковой области:  $\rho(x, t) = \int_{-1}^x \frac{B-A}{w} dx = \frac{1}{w^2} (P+Q-2)$ ,  $-1 < w \equiv 2t < 1$ ,  $w \neq 0$ ,  $-1 \leq x \leq 1$ .

Однако справедливость полученного выражения в данном разделе обоснована только для  $|t| < 1/2$ .

Ряд (54) для скорости в дозвуковой области течения аналогичным образом приводится к виду

$$u(x, t) = -2 \sum_{k=0}^{\infty} (2t)^{2k+1} \int_{-1}^x P_{2(k+1)}(x) dx, \quad (63)$$

и в области  $-1 < w < 1$ ,  $w \neq 0$ ,  $-1 \leq x \leq 1$  суммированием получается выражение (40). В (61) и (63) можно избавиться от интегралов с помощью известной формулы ([8], с. 162)

$$\int_{-1}^x P_k(x) dx = \frac{1}{2k+1} (P_{k+1}(x) - P_{k-1}(x)).$$

## 5. Численное моделирование задачи

Численное моделирование задачи, поставленной в разд. 4, проводилось по *двумерной* методике ЭГАК [9] в эйлеровых переменных на квадратных неподвижных сетках. В расчетах в поперечном направлении ( $OY$ ) бралось 3 ячейки, а в направлении  $Ox$  в области  $-3 \leq x \leq 3$  бралось  $N = 1200$ ,  $2N$  и  $4N$  ячеек с соответствующими размерами  $h = 0,005; 0,0025; 0,00125$ . Граничные условия: *вытекания* на вертикальных границах и *жесткие стенки* — на горизонтальных. Распределение плотности задавалось по формуле  $\rho_i = 1 - x_i^2$  для  $|x_i| < 1$ ,  $\rho_i = 0$  для  $1 < |x_i| < 3$ , где  $x_i$  — координата центра  $i$ -й ячейки. Уравнение состояния использовалось в стандартной форме  $p = 2\rho e$ . Начальная внутренняя энергия вычислялась по формуле  $e = \rho^2/6$ . Поскольку в задаче рассматривается политропный газ  $p = A\rho^3$ ,  $A \equiv A(S)$ ,  $A(S) = R \exp((S - S_0)/c_V)$ , с константой  $A = 1/3$ , погрешность энтропии оценивалась по степени выполнения тождества  $p/\rho^3 \equiv 1/3$ .

Для оценки точности численных расчетов использовалась процедура отображения эталонного решения на соответствующую сетку ЭГАК. Погрешность плотности в ячейке с номером  $i$  вычислялась по формуле  $\delta\rho_i = \rho_i - \rho_i^{etalon}$ , где  $\rho_i^{etalon}$  — эталонное значение плотности в центре ячейки.

Относительная интегральная погрешность плотности (в норме  $L_1$ ) вычислялась по формуле

$$\|\delta\rho\|_{L_1} = \frac{\sum_i |\delta\rho_i| V_i}{\sum_i \rho_i^{etalon} V_i},$$

где  $V_i$  — объем  $i$ -й ячейки. Функция  $\|\delta\rho\|_{L_1}$  аппроксимировалась выражением  $C(h/h_0)^\sigma$ , где  $h_0$  — размер ячейки самой грубой сетки. Параметры  $C$  и  $\sigma$ , определяющие порядок сходимости, находились методом наименьших квадратов. Аналогичные формулы использовались для давления и энтропии.

Результаты расчетов представлены на рис. 6–9.  $(X, t)$ -диаграммы границ области приведены на рис. 6. Профили плотностей на моменты времени, предшествующие времени начала разлета области, изображены на рис. 7, после начала разлета — на рис. 8. Для большей наглядности на рисунках приведены лишь результаты, полученные в расчетах на самой грубой сетке (с  $h = 0,005$ ). Помимо этого на рис. 9 (см. также цветную вкладку) представлен эталонный профиль плотности вместе с

локальными погрешностями  $\delta\rho$  для каждой счетной сетки на момент времени  $t = 1$ . Сводные данные об относительных интегральных погрешностях плотности, давления и энтропийной функции ( $p/\rho^3$ ) газа на момент времени  $t = 1$  приведены в таблице и на рис. 10. Отметим, что в расчетах имеет место близкая к линейной сходимость решения.

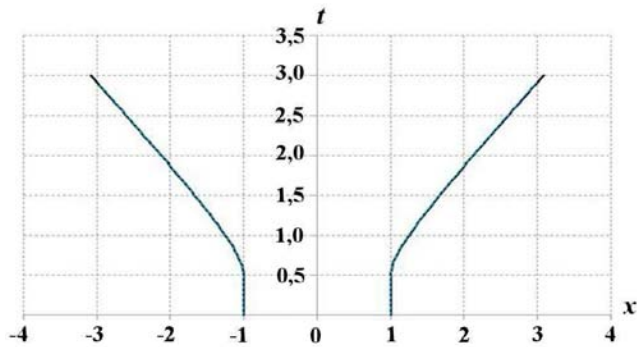


Рис. 6.  $(X,t)$ -диаграммы границ области: — — аналитическое решение; - - - - расчет на сетке размером  $N$  ( $h = 0,005$ )

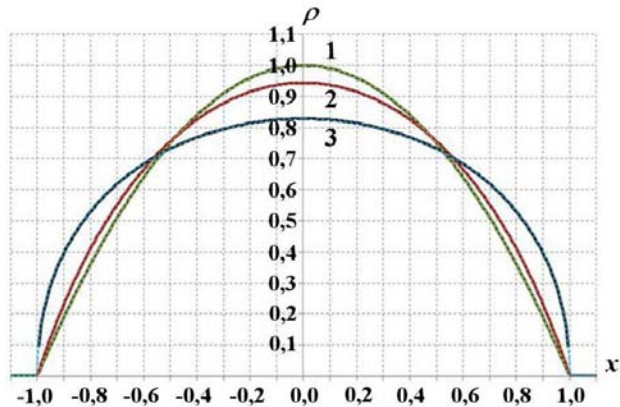


Рис. 7. Профили плотности на моменты времени до начала разлета области: 1 —  $t = 0$ ; 2 —  $t = 0,25$ ; 3 —  $t = 0,5$ ; — — аналитическое решение; - - - - расчет на сетке размером  $N$  ( $h = 0,005$ )

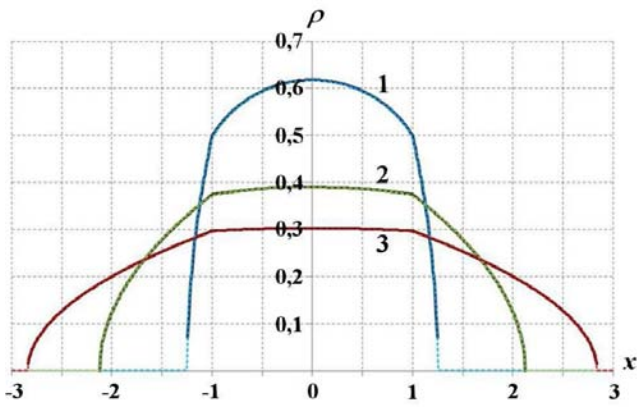


Рис. 8. Профили плотности на моменты времени после начала разлета области: 1 —  $t = 1$ ; 2 —  $t = 2$ ; 3 —  $t = 2,75$ ; — — аналитическое решение; - - - - расчет на сетке размером  $N$  ( $h = 0,005$ )

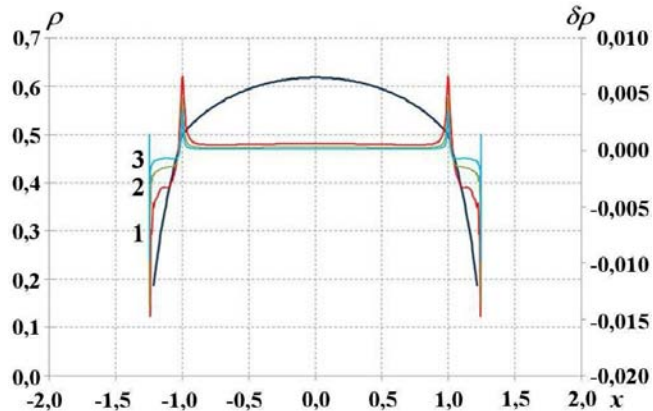


Рис. 9. Эталонный профиль плотности (—) и локальные погрешности  $\delta\rho$  на момент времени  $t = 1$ : 1 — на сетке  $N$  ( $h = 0,005$ ); 2 — на сетке  $2N$  ( $h = 0,0025$ ); 3 — на сетке  $4N$  ( $h = 0,00125$ )

**Нормы относительных интегральных погрешностей и порядки сходимости для плотности, давления и энтропийной функции газа на момент времени  $t = 1$**

Величина	$\ \delta\ _{L_1}$			$C$	$\sigma$
	$N$	$2N$	$4N$		
$\rho$	0,0024	0,0009	0,0006	0,0024	1,00
$p/\rho^3$	0,010025	0,006823	0,004396	0,01	0,59
$p$	$9,82 \cdot 10^{-6}$	$3,09 \cdot 10^{-6}$	$1,65 \cdot 10^{-6}$	$9,82 \cdot 10^{-6}$	1,29

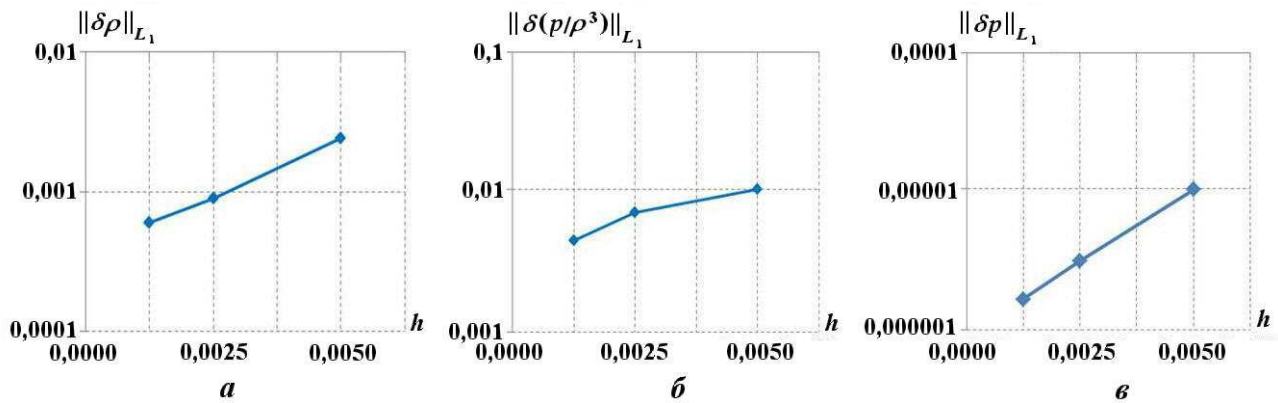


Рис. 10. Зависимости относительных интегральных погрешностей плотности (а), функции энтропии газа (б) и давления (в) от размеров счетной сетки на момент времени  $t = 1$

### Заключение

Предложен способ конструирования точных решений уравнений одномерной газовой динамики, описывающих изэнтропический разлет в вакуум идеального газа и обладающих рядом специфических свойств. Проведено подробное исследование решений найденного класса. В качестве примера детально описано решение частной задачи, которое может быть использовано как тестовое. Приведены результаты расчетов данной задачи по методике ЭГАК, которые хорошо согласуются с аналитическим решением.

При использовании описанного частного решения для тестирования численного метода можно проверить следующие его особенности: сохранение симметрии течений, степень сохранения энтропии в изэнтропических течениях, качество описания течений в окрестностях слабых и сильных разрывов и на границах с вакуумом. Дополнительную информацию о точности численного метода может дать проверка выполнения в численном решении основных качественных свойств точного решения: неподвижность звуковых точек (точек слабого разрыва), неподвижность границ течения до момента времени  $t^* = 1/2$ , движение линий вакуума (кривых градиентных катастроф) согласно закону (39).

### Список литературы

1. Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. М.: Наука, 1968.
2. Овсянников Л. В. Лекции по основам газовой динамики. М.: Наука, 1981.
3. Станюкович К. П. Неустановившиеся движения сплошной среды. М.: Наука, 1971.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
5. Арнольд В. И. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1979.
6. Уизем Дж. Линейные и нелинейные волны. М.: Мир, 1977.
7. Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М.: Наука, 1986.
8. Суетин П. К. Классические ортогональные многочлены. М.: Наука, 1979.

9. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А. и др. Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54–65.

Статья поступила в редакцию 20.11.14.

ON A MODE OF IDEAL GAS PLANAR LAYER EXPANSION INTO VACUUM /  
V. E. Shemarulin, S. S. L'vova, Yu. V. Yanilkin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny  
Novgorod Region).

We have discovered and investigated in detail the class of exact solutions of the gas dynamic equations that describe the isentropic ideal gas expansion into vacuum, when the gas fills a finite-thickness plane layer, in the case of specifically preset initial distributions of gas-dynamic parameters at the adiabatic index of 3.

As an example, the particular case with the zero gas initial velocity, while the initial density velocity, in accordance with quadratic law, turns into zero on the gas-vacuum interface. The obtained particular solution can be used for testing the techniques and programs for numerical solving the gas dynamics problems.

*Keywords:* 1D gas dynamics equations, ideal gas, isentropic expansion into vacuum, exact solutions, numerical solution.

---



УДК 538.911

## МОДЕЛИРОВАНИЕ НАКОПЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ЧИСТОМ МОЛИБДЕНЕ МЕТОДАМИ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ И КЛАСТЕРНОЙ ДИНАМИКИ

М. Ю. Ромашка, А. В. Янилкин  
(ВНИИА им. Н. Л. Духова, г. Москва)

Проведено моделирование накопления радиационных дефектов в тонких пленках чистого молибдена под действием ионного облучения. Использованы два подхода к моделированию: кинетическая теория со средними размерами кластеров и кластерная динамика. Выявлена ограниченность области применимости первого подхода.

В случае кластерной динамики полученные результаты хорошо согласуются как с экспериментом, так и с расчетами других авторов. Предложена реализация нового, стохастического подхода к кластерной динамике на основе кода SPPARKS. Преимущества и недостатки этого подхода обсуждаются в статье.

*Ключевые слова:* кинетическая теория, кластерная динамика, ионное облучение, тонкие пленки, молибден, точечные дефекты, SPPARKS.

### Введение

Одной из основных задач радиационного материаловедения является расчет радиационного распухания материалов, которое связано с накоплением в них точечных дефектов и их кластеров при облучении высокоэнергичными частицами. Для расчета накопления дефектов и их кластеров за большие периоды времени (порядка срока службы атомных реакторов) или при больших дозах облучения применяются различные варианты кинетической теории. В данной работе представлены два подхода к моделированию накопления дефектов: кинетическая теория, оперирующая средними размерами вакансионных и междоузельных кластеров, и кластерная динамика (КД).

Первый подход, идея которого основана на работе [1], будем называть кинетической теорией со средними размерами (КТСР). КТСР в некотором смысле является более грубой, чем используемая рядом авторов КД [2–4], поскольку не учитывает распределения кластеров по размерам. Тем не менее метод КТСР, будучи более простым и экономичным в вычислительном плане, использовался в ряде работ (например [1, 5]). В данной работе КТСР применена для расчета накопления дефектов в тонких пленках чистого молибдена при ионном облучении. Далее аналогичные расчеты проведены с использованием второго, более продвинутого подхода — КД. Результаты, полученные в рамках обоих подходов, сопоставляются с экспериментальными данными, приведенными в работе [2].

В [2] были представлены как эксперименты по облучению тонких пленок молибдена, так и их моделирование методом КД. В этой работе показано, что при моделировании экспериментов необходимо учесть следующие факторы: генерацию небольших кластеров точечных дефектов в каскадах смещений атомов и диффузию кластеров. При этом важно учесть баланс между генерацией кластеров в каскадах и выходом кластеров на поверхность в результате диффузии. В частности, необходимо учесть зависимость коэффициента диффузии от размера кластера (в случае молибдена речь идет о междоузельных кластерах, поскольку подвижность вакансий и их кластеров много меньше, чем подвижность междоузлий и их кластеров). В связи с этим при попытке смоделировать облучение пленок молибдена с помощью КТСР авторы столкнулись с трудностью: в рамках

этой модели нельзя задавать различные коэффициенты диффузии для кластеров различных размеров. Попытки задать некоторый средний коэффициент диффузии для кластеров среднего размера потерпели неудачу. Главная причина в том, что в реальности имеются две категории кластеров: маленькие, которые активно генерируются в каскадах и быстро выходят на поверхность, и большие, которые редко генерируются в каскадах (образуются за счет роста небольших кластеров) и практически не выходят на поверхность. Эти два типа кластеров нельзя заменить одним типом кластеров со средним размером и средним коэффициентом диффузии. Аналогичная проблема возникла при моделировании облучения тонких пленок чистого железа (эксперименты описаны в работах [6, 7]).

Таким образом, была выявлена ограниченность области применимости КТСР. Эту модель следует применять с осторожностью в случаях, когда имеется генерация кластеров дефектов в каскадах и уход кластеров на стоки — поверхность, межзеренные границы и дислокации. В этих случаях вместо КТСР предпочтительнее использовать КД, которая, хотя и более затратна в вычислительном плане, но дает полную информацию о распределении кластеров по размерам и о концентрации кластеров каждого размера в каждый момент времени.

Авторами был реализован стохастический подход к КД, идея которого основана на работе [8]. Результаты расчетов методом КД находятся в хорошем согласии как с экспериментальными, так и с расчетными данными работы [2], хотя предлагаемый авторами метод реализации КД отличается от использованного в [2]. В настоящей работе обсуждаются преимущества и недостатки предлагаемого метода.

### Кинетическая теория со средними размерами кластеров

Рассмотрим плоскопараллельную пластину толщиной  $h$ , состоящую из поликристаллов с характерным размером зерна  $d$  (рис. 1), облучаемую потоком высокоэнергичных частиц, падающих по нормали к пластине. Такая геометрия образца позволяет моделировать эксперименты по облучению как тонких пленок при малой  $h$  (часто  $h < d$ ), так и объемного образца при большой  $h$ .

Будем считать, что облучение происходит при постоянной температуре ( $T = \text{const}$  как во времени, так и по объему образца), плотность потока частиц также однородна и постоянна и, более того, генерация дефектов и их малых кластеров происходит однородно по всему объему пластины. Последнее приближение справедливо, вообще говоря, лишь в случае, когда толщина пластины много меньше длины свободного пробега облучающих частиц. В экспериментах, описанных в работе [2], это условие выполняется. Также будем считать, что ориентация кристаллических осей кристаллитов хаотическая (т. е. не будем учитывать возможную корреляцию между направлением потока частиц и направлением осей). Задача состоит в расчете накопления дефектов и их кластеров в такой системе.

Рассматриваемая модель позволяет изучать зависимости от времени (или дозы облучения) шести величин:  $C_i$  — концентрации междоузлий (число междоузлий на один узел решетки — безразмерная величина);  $C_v$  — концентрации вакансий;  $V$  — среднего объема вакансионных кластеров (среднего числа вакансий в кластере);  $L$  — среднего диаметра междоузельных петель (в единицах длины);  $C_{loop}$  — концентрации петель со средним диаметром;  $C_{void}$  — концентрации вакансионных кластеров (пор) среднего размера.

Введем также в рассмотрение следующие величины:  $G$  — скорость генерации френкелевских пар на один узел решетки;  $R$  — средний радиус вакансионных кластеров;  $D_i, D_v$  — коэффициенты диффузии междоузлий и вакансий;  $b$  — вектор Бюргера вакансионной петли;  $\Omega$  — атомный объем;  $Z_{il}, Z_{vl}, Z_{ic}, Z_{vc}$  — эффективности захвата междоузлий ( $i$ ) и вакансий ( $v$ ) междоузельными петлями ( $l$ ) и вакансионными порами ( $c$ );  $\theta$  — тета-функция Хевисайда;  $\rho$  — плотность дислокаций;  $f_1, f_2$  — коэффициенты, характеризующие зарождение небольших кластеров в каскадах при облучении;  $k_{iv} =$

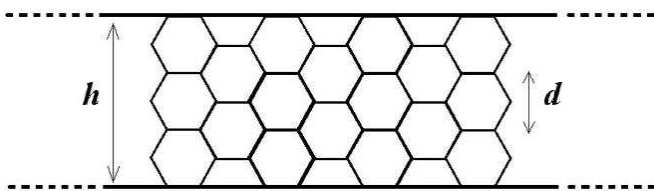


Рис. 1. Модель облучаемого образца

$= \frac{4\pi r_{iv}}{\Omega} (D_i + D_v)$ ,  $k_{ii} = \frac{8\pi r_{ii}}{\Omega} D_i$ ,  $k_{vv} = \frac{8\pi r_{vv}}{\Omega} D_v$  — константы скоростей реакций рекомбинации вакансий и междоузлия, слияния двух междоузлий, слияния двух вакансий соответственно;  $k_g = 15/d^2$ ,  $k_s = 8/h^2$  — коэффициенты, характеризующие силы стоков на межзеренные границы и поверхность;  $\delta$  — величина, характеризующая радиус взаимодействия одиночных дефектов с вакансионными порами;  $\alpha$ ,  $\beta$  — размеры междоузельных и вакансионных кластеров, генерируемых в каскадах. Размеры  $\alpha$  и  $\beta$  выражаются количеством единичных дефектов, входящих в кластер. Коэффициенты  $f_1$  и  $f_2$  представляют собой отношения числа междоузлий и вакансий, генерируемых в виде малых кластеров, к общему числу генерируемых междоузлий и вакансий.

Кластеры (петли и поры) в данной модели считаются неподвижными, а межзеренные границы и поверхность считаются абсолютными стоками. Тогда для указанных выше шести величин можно записать систему из шести дифференциальных уравнений, аналогичных использованным в [1], но с небольшими модификациями.

Для концентрации междоузлий имеем

$$\begin{aligned} \frac{dC_i}{dt} = & G(1 - f_1) - k_{iv}C_iC_v - 2k_{ii}C_iC_i - \frac{2\pi L}{b^3}Z_{il}D_iC_iC_{loop} + \frac{2\Omega^{-2/3}b}{\pi L}Z_{vl}D_vC_vC_{loop}\theta\left(2,5 - \frac{L}{b}\right) - \\ & - \frac{4\pi(R + \delta)}{\Omega}Z_{ic}D_iC_iC_{void} - \rho Z_{il}\left[1 + \frac{6(\rho Z_{il})^{-0,5}}{d}\right]D_iC_i - (k_g + k_s)D_iC_i. \end{aligned} \quad (1)$$

Структура этого уравнения показана на следующей блок-схеме, в которой порядок блоков соответствует порядку членов в уравнении:

$$\begin{aligned} \frac{dC_i}{dt} = & \boxed{\text{Генерация междоузлий}} - \boxed{\text{Рекомбинация с вакансиями}} - \boxed{\text{Образование димеждоузлий}} - \boxed{\text{Уход междоузлий на междоузельные петли}} + \\ & + \boxed{\text{Образование междоузлия при рекомбинации димеждоузлия с вакансией}} - \boxed{\text{Уход междоузлий на вакансионные кластеры}} - \\ & - \boxed{\text{Уход междоузлий на дислокации}} - \boxed{\text{Уход междоузлий на межзеренные границы и на поверхность}}. \end{aligned}$$

Аналогичное уравнение имеем для концентрации вакансий:

$$\begin{aligned} \frac{dC_v}{dt} = & G(1 - f_2) - k_{iv}C_iC_v - 2k_{vv}C_vC_v - \frac{2\pi L}{b^3}Z_{vl}D_vC_vC_{loop} + \frac{4\pi(R + \delta)}{\Omega}Z_{ic}D_iC_iC_{void}\theta(2,5 - V) - \\ & - \frac{4\pi(R + \delta)}{\Omega}Z_{vc}D_vC_vC_{void} - \rho Z_{vl}\left[1 + \frac{6(\rho Z_{vl})^{-0,5}}{d}\right]D_vC_v - (k_g + k_s)D_vC_v. \end{aligned} \quad (2)$$

Для среднего диаметра междоузельных петель имеем уравнение

$$\frac{dL}{dt} = \frac{4}{b}Z_{il}D_iC_i - \frac{4}{b}Z_{vl}D_vC_v\theta\left(\frac{L}{b} - 2,5\right) - (L - 2b)\frac{\frac{dC_{loop}}{dt} - G\frac{f_1}{\alpha}}{C_{loop}} \quad (3)$$

со следующей структурой:

$$\frac{dL}{dt} = \boxed{\text{Увеличение за счет прихода междоузлий}} - \boxed{\text{Уменьшение за счет прихода вакансий}} - \boxed{\text{Уменьшение за счет рождения димеждоузлий и небольших кластеров в каскадах}}.$$

Аналогичное уравнение имеем для среднего объема вакансионных кластеров:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{4\pi(R + \delta)}{\Omega}\left[Z_{vc}D_vC_v - Z_{ic}D_iC_i\theta(V - 2,5)\right] - (V - 2)\frac{\frac{dC_{void}}{dt} - G\frac{f_2}{\beta}}{C_{void}}. \quad (4)$$

Для концентрации междоузельных петель имеем уравнение

$$\frac{dC_{loop}}{dt} = G \frac{f_1}{\alpha} + k_{ii} C_i C_i - \frac{2\Omega^{-2/3} b}{\pi L} Z_{vl} D_v C_v C_{loop} \theta \left( 2,5 - \frac{L}{b} \right) \quad (5)$$

со следующей структурой:

$$\frac{dC_{loop}}{dt} = \boxed{\text{Зарождение небольших кластеров в каскадах}} + \boxed{\text{Зарождение димеждоузлий}} - \boxed{\text{Уничтожение димеждоузлия при встрече с вакансией}}.$$

Аналогичное уравнение имеем для концентрации вакансионных кластеров (пор):

$$\frac{dC_{void}}{dt} = G \frac{f_2}{\beta} + k_{vv} C_v C_v - \frac{4\pi (R + \delta)}{\Omega} Z_{ic} D_i C_i C_{void} \theta (2,5 - V). \quad (6)$$

В этих уравнениях функция Хевисайда  $\theta$  осуществляет переключение между двумя режимами: когда средний размер кластеров больше 2,5 одиночных дефектов и когда средний размер кластеров меньше или равен 2,5 одиночных дефектов. Во втором режиме средний поток вакансий на междоузельные петли больше среднего потока междоузлий, поэтому образующиеся петли не растут. Аналогичное справедливо и для вакансий.

Отличия полученных уравнений от использованных в работе [1] состоят в присутствии в них:

- функции Хевисайда, осуществляющей переключение между режимами;
- членов, отвечающих за генерацию кластеров с размерами  $\alpha$  и  $\beta$  в каскадах и соответствующее изменение средних размеров кластеров;
- стоков на дислокации; при этом плотность дислокаций считается постоянной.

Различия в виде уравнений (1) и (2) связаны с тем, что междоузельные кластеры представляют собой дислокационные петли, а вакансионные — сферические поры.

Система полученных уравнений решается численно с помощью пакета Mathematica. При этом функция Хевисайда заменяется сглаженной функцией. Радиусы взаимодействия положены равными  $r_{ii} = r_{vv} = r_{iv} = 2a$ , где  $a$  — постоянная решетки.

### Расчет накопления дефектов в тонких пленках молибдена с помощью КТСР

Применим КТСР для расчета накопления дефектов в чистом молибдене, взяв входные параметры из работы [2]. Зависимость коэффициентов диффузии междоузлий и вакансий от температуры в чистом молибдене описывается уравнением Аррениуса:

$$D_i = D_{0i} e^{-E_i/T}; \quad D_v = D_{0v} e^{-E_v/T},$$

где  $E_i$ ,  $E_v$  — энергии активации миграции междоузлий и вакансий, выраженные в тех же единицах, что и температура  $T$ ;  $D_{0i}$ ,  $D_{0v}$  — предэкспоненциальные множители.

Энергии активации миграции междоузлий и вакансий в молибдене согласно [2] равны  $E_i = 0,084$  эВ и  $E_v = 1,35 \div 1,89$  эВ (для вакансий эта величина известна с меньшей точностью).

В [2] были выполнены три варианта расчетов, которые сравнивались с экспериментом.

В первом варианте все кластеры были неподвижными (диффундировали только одиночные дефекты) и генерация кластеров в каскадах отсутствовала. Как было показано авторами [2], этот вариант не воспроизводит эксперимента. А именно, если взять приближенные значения энергий активации  $E_i = 0,1$  эВ;  $E_v = 1,3$  эВ и предэкспонент  $D_{0i} = D_{0v} = 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с, концентрации петель получают на четыре порядка меньше экспериментально наблюдаемых. Это объясняется тем, что междоузлия слишком быстро диффундируют на поверхность пленки и не успевают образовывать кластеры.

Во втором варианте расчетов кластеры были подвижными, но генерация кластеров в каскадах по-прежнему отсутствовала. В этом случае наблюдалось еще большее расхождение с экспериментом (еще больший дефицит концентрации кластеров, что понятно, поскольку они диффундировали на поверхность).

В третьем варианте расчетов кластеры были подвижны и вместе с тем была введена генерация кластеров в каскадах. Последнее позволило привести расчеты в согласие с экспериментом. Таким образом, авторами [2] было показано, что в случае молибдена существенную роль в накоплении кластеров дефектов в тонких пленках играет генерация этих кластеров в каскадах.

Однако, как уже отмечалось, КТСР не учитывает распределения кластеров по размерам, а оперирует только средним размером кластеров. Как следствие, в этой модели нельзя ввести различные коэффициенты диффузии для кластеров разных размеров. Можно ввести лишь диффузию для кластеров среднего размера. Но при этом никак не учитывается, что реально существуют малые кластеры, генерируемые в каскадах, и большие (выросшие) кластеры, причем малые кластеры диффундируют быстрее больших. В связи с этим КТСР не может в полной мере воспроизвести картину диффузии кластеров.

Тем не менее можно сравнить расчеты, выполненные авторами настоящей работы, с первым вариантом расчетов из [2], где кластеры были неподвижными и генерация в каскадах отсутствовала. Авторами [2] было проведено четыре серии расчетов для различных значений энергии активации миграции междоузлий: 0,1, 0,3, 0,4 и 0,5 эВ. Остальные параметры (в том числе предэкспоненты) в этих сериях расчетов брались одинаковыми. Были взяты следующие значения параметров:  $T = 353$  К;  $G = 5 \cdot 10^{-4}$  с $^{-1}$ ;  $a = 3,14 \cdot 10^{-10}$  м;  $b = 2 \cdot 10^{-10}$  м. Начальные концентрации междоузлий, вакансий, петель и пор равны  $10^{-18}$ ;  $h = 105$  нм;  $d = 1$  мкм;  $\delta = 2a$ ;  $Z_{il} = 1,2$ ;  $Z_{vl} = Z_{ic} = Z_{vc} = 1$ ;  $f_1 = f_2 = 0$  (нет генерации кластеров в каскадах);  $\rho \rightarrow 0$  (нет дислокаций).

Результаты расчетов, полученные в работе [2], а также результаты расчетов авторов настоящей работы в рамках КТСР приведены на рис. 2. Показана зависимость поверхностной плотности петель  $S$  от дозы облучения  $\Phi$ . Видно, что результаты авторских расчетов несколько завышены по сравнению с [2], хотя и не намного, а формы кривых совпадают. Отличия могут быть обусловлены тем, что в настоящей работе рассчитывается полная концентрация петель, тогда как в [2] приведена концентрация только видимых петель.

Возникает вопрос: каков будет результат, если в рамках КТСР провести расчет с учетом генерации кластеров в каскадах? Если полагать кластеры неподвижными, то ответ следующий: концентрация кластеров получается на несколько порядков больше наблюдаемой в эксперименте. Это связано с тем, что в эксперименте в каскадах образуются малые кластеры, которые обладают подвижностью, хотя и меньшей, чем одиночные междоузлия. Малые кластеры выходят на поверхность, вследствие чего их концентрация уменьшается. Поэтому, если не учитывать выход кластеров на поверхность, рассчитанная концентрация окажется завышенной.

Пытаясь учесть выход кластеров на поверхность, авторы ввели в КТСР диффузию кластеров среднего размера к поверхности (слияние кластеров не учитывается). Для этого в правую часть уравнения (5) был добавлен член, аналогичный последнему члену в правой части (1), описывающему выход междоузлий на поверхность и межзеренные границы. Этот член имеет вид  $-(k_s + k_g) \frac{D_{0c}}{n^s} \times e^{-(p+qn)/T} C_{loop}$ , где  $n$  — число междоузлий в кластере;  $s$  — безразмерный подгоночный параметр;  $D_{0c}$  — предэкспонента в коэффициенте диффузии кластеров;  $p + qn$  — выражение для энергии активации диффузии. В соответствии с работой [2] были выбраны следующие значения параметров:  $D_{0c} = D_{0i} = 2 \cdot 10^{-7}$  м $^2$ /с;  $p = 0,063$  эВ;  $q = 0,037$  эВ. Параметр  $s$  был выбран равным 0,25 (меньше, чем значения, использованные в [2]), для того чтобы сделать убывание коэффициента диффузии с ростом  $n$  более плавным. Предпосылки этого обсуждаются ниже.

Расчет концентрации петель в зависимости от дозы облучения выполнялся для следующего набора входных параметров (соответствуют третьему варианту расчетов в работе [2]):  $E_i = 0,1$  эВ;  $E_v = 0,9$  эВ;  $D_{0i} = D_{0v} = 2 \cdot 10^{-7}$  м $^2$ /с;  $T = 353$  К;  $G = 5 \cdot 10^{-4}$  с $^{-1}$ ;  $a = 3,14 \cdot 10^{-10}$  м;  $b = 2 \cdot 10^{-10}$  м. Начальные концентрации междоузлий, вакансий, петель и пор равны  $10^{-18}$ ;  $h = 60$  нм;  $d = 1$  мкм;  $\delta = 2a$ ;  $Z_{il} = 1,2$ ;  $Z_{vl} = Z_{ic} = Z_{vc} = 1$ ;  $f_1 = 0,1$ ;  $f_2 = 0$  (малые кластеры междоузлий генерируются в каскадах);  $\rho \rightarrow 0$  (нет дислокаций). Размер генерируемых в каскадах кластеров  $\alpha = 4$ .

На рис. 3 показан результат расчета поверхностной плотности петель и его сравнение с данными из [2]. Видно, что даже при небольшой интенсивности генерации петель в каскадах результаты расчета в рамках КТСР примерно на два-три порядка превышают результаты эксперимента. Причина в том, что средний размер кластеров, фигурирующий в КТСР, оказывается существенно больше

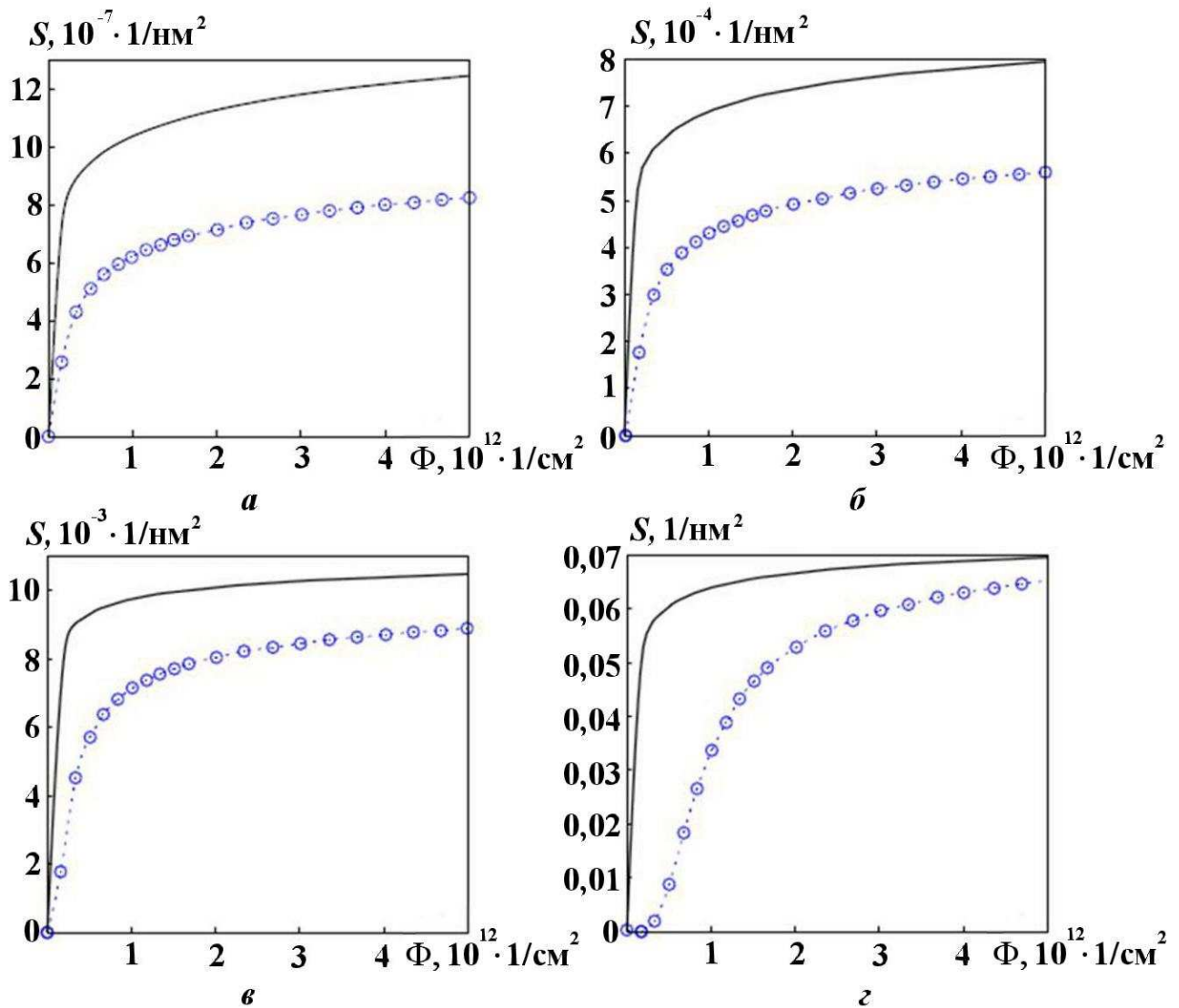


Рис. 2. Расчетные зависимости поверхностной плотности петель от дозы облучения: а —  $E_i = 0,1$  эВ; б —  $E_i = 0,3$  эВ; в —  $E_i = 0,4$  эВ; з —  $E_i = 0,5$  эВ;  $\dots \circ \dots$  — из [2]; — — авторские в рамках КТСР

размеров малых кластеров, генерируемых в каскадах. Из-за этого коэффициент диффузии кластеров среднего размера много меньше коэффициента диффузии кластеров, возникающих в каскадах. Как следствие, кластеры среднего размера недостаточно интенсивно выходят на поверхность и накапливаются существенно быстрее, чем кластеры, реально возникающие в каскадах. Отметим, что если в КТСР "отключить" диффузию петель на поверхность, то расчетная кривая на рис. 3 практически не изменится. Это свидетельствует о том, что выход петель на поверхность в расчетах мал в силу малости коэффициента диффузии.

Таким образом, можно сделать вывод, что для корректного расчета накопления дефек-

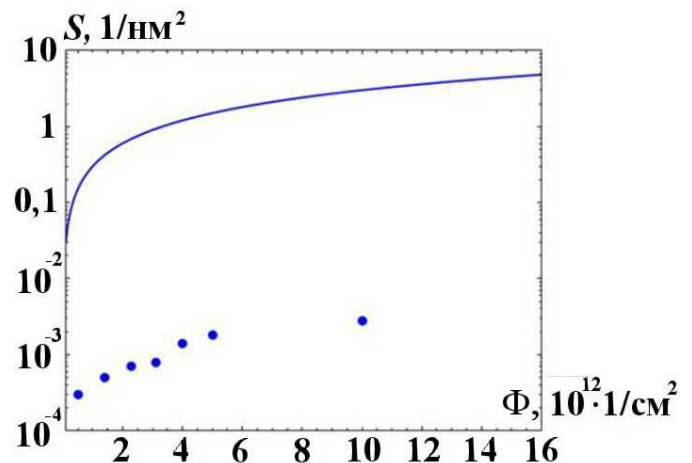


Рис. 3. Зависимости поверхностной плотности петель от дозы облучения: — — расчет в рамках КТСР;  $\bullet$  — экспериментальные данные из работы [2]

тов и их кластеров в тонких пленках молибдена необходима КД, позволяющая задавать разные коэффициенты диффузии для кластеров разных размеров (или по крайней мере кинетическая модель с двумя размерами кластеров, один из которых соответствует малым кластерам, генерируемым в каскадах).

### КД и ее стохастическая реализация

Суть КД заключается в решении системы дифференциальных уравнений, неизвестными функциями в которой являются концентрации кластеров различных размеров (состоящих из различного числа отдельных дефектов). При этом подходе для каждого размера кластера записывается свое уравнение и решается система из большого числа уравнений. Например, если в рассматриваемой задаче междоузельные и вакансионные кластеры максимального размера состоят из 2 000 дефектов, то необходимо решать систему из 4 000 уравнений (2 000 для кластеров вакансий и 2 000 для кластеров междоузлий). Такой подход вычислительно более затратен, чем КТСР, зато он дает более подробное описание динамики концентраций дефектов.

Структура уравнений КД подробно описана, например, в работах [3, 4]. Уравнение для концентрации  $C_n$  кластеров размером  $n$  (состоящих из  $n$  дефектов) имеет следующий общий вид:

$$\frac{dC_n}{dt} = G_n + \sum_m w_{m \rightarrow n} C_m - \sum_m w_{n \rightarrow m} C_n - S_{surf} - S_{grain} - S_{disl}, \quad (7)$$

где в левой части — производная концентрации по времени, а в правой — все возможные источники и стоки. Здесь  $G_n$  — скорость генерации кластеров размером  $n$ ;  $w_{m \rightarrow n}$  — скорость перехода кластеров размером  $m$  в кластеры размером  $n$  (эта величина имеет смысл вероятности перехода в единицу времени). Также в правой части уравнения содержатся стоки  $S_{surf}$ ,  $S_{grain}$ ,  $S_{disl}$  — на поверхность, межзеренные границы и дислокации. Все эти члены полностью аналогичны используемым в КТСР. Часто принимается следующее соглашение о переменных  $n$  и  $m$ : для междоузельных кластеров они имеют положительные значения, а для вакансионных — отрицательные (или наоборот). Авторы используют первый вариант: переменные положительны для междоузельных кластеров и отдельных междоузлий.

Авторами был реализован стохастический подход к КД, основанный на методе, описанном в классической работе [8]. Отметим, что КД по своей сути аналогична химической кинетике: в ней решаются аналогичные уравнения, только в качестве реагентов выступают кластеры различных размеров. В работе [8] был описан новый подход к химической кинетике: вместо решения системы уравнений для концентраций (или числа частиц) было предложено стохастически моделировать изменение числа частиц в конечном объеме методом Монте-Карло. В этом подходе предполагается, что имеется набор из  $N$  типов частиц (реагентов), равномерно распределенных в объеме  $V$ , и набор из  $M$  элементарных процессов (реакций), в которых могут участвовать реагенты. Разыгрывается последовательность шагов, на каждом из которых случайным образом (с некоторым заданным распределением вероятности) выбирается происходящая реакция. Каждой реакции присваивается некоторый интервал физического времени (выбираемый случайно с некоторым заданным распределением вероятности и зависящий от общего числа объектов в системе). Вероятности той или иной реакции, а также интервалы времени, присваиваемые каждой реакции, выбираются исходя из констант скоростей реакций (т. е. коэффициентов в кинетических уравнениях).

Описанный в [8] подход к химической кинетике реализован в программе SPPARKS [9]. Если в качестве реагентов взять точечные дефекты и их кластеры, то можно реализовать КД, что и было сделано в настоящей работе. Особенностью КД является большое число типов реагентов и большое число реакций. Для автоматизации задания реакций был написан генератор скрипта для SPPARKS на языке Python. Также на Python написана программа диагностики, позволяющая обрабатывать выходной файл, получаемый в результате моделирования в SPPARKS.

Все реакции, рассматриваемые в данной реализации КД, можно разделить на четыре типа:

- 1) нулевого порядка: генерация дефектов каждого типа;

- 2) первого порядка: уход дефектов на поверхность, межзеренные границы и дислокации. Плотность дислокаций в текущей версии программы является заданной константой;
- 3) второго порядка: реакции вида  $A + B \rightarrow C$ . К этим реакциям относится слияние дефектов и кластеров и их рекомбинация (в том числе рекомбинация "противоположных" дефектов, например одиночной вакансии и одиночного междоузлия);
- 4) отдельная группа — реакции диссоциации (распада) кластеров, которые имеют вид  $C \rightarrow A + B$ . Основным каналом распада, как известно [4], является отщепление одиночного дефекта (вакансии или междоузлия) от кластера. Во всех известных работах по КД при моделировании диссоциации ограничиваются отщеплением одиночных дефектов. Авторы также следуют этому приближению.

Отметим, что моделирование накопления радиационного повреждения методом КД требует, в частности, знания коэффициентов диффузии и скоростей генерации как кластеров каждого размера в каскадах, так и отдельных дефектов.

На сегодняшний день имеются трудности в расчете коэффициентов диффузии кластеров дефектов даже для чистых металлов. По этой причине пока не удалось смоделировать накопление радиационного повреждения в тонких пленках чистого железа. Молекулярно-динамические расчеты (см., например, [10]) дают для кластеров значения коэффициентов диффузии, которые, как показывают дальнейшие расчеты с помощью КД, являются завышенными. Можно предположить, что главной причиной этого расхождения является многообразие форм кластеров, возникающих при слиянии более мелких кластеров (кластеры с одним и тем же числом междоузлий могут иметь различные конфигурации).

Отметим следующие преимущества реализованного стохастического варианта КД по сравнению с традиционным вариантом, использованным, например, в [3, 4]:

1. Удобство задания набора реакций в программе SPPARKS. Например, в традиционной КД реакции вида  $A + B \rightarrow C$  соответствуют три члена в системе уравнений: два стока в уравнениях для компонентов  $A$  и  $B$  и один источник в уравнении для  $C$ , тогда как в SPPARKS каждая реакция задается одной строкой.
2. Стохастическая реализация КД является более стабильной, чем традиционная, поскольку она не связана с решением системы дифференциальных уравнений. Алгоритм, реализующий стохастическую КД, в некотором смысле проще алгоритма решения системы дифференциальных уравнений, поскольку он не включает в себя такие детали, как выбор шага в разностной схеме.

Рассмотренный стохастический вариант КД имеет также и некоторые недостатки:

1. Поскольку он связан с моделированием динамики числа частиц в конечном объеме  $V$ , концентрации всех реагентов, если они отличны от нуля, ограничены снизу значением  $1/V$ . Увеличение объема  $V$  приводит к возрастанию времени счета. Это может привести к неудобствам при изучении систем, в которых концентрации различных реагентов сильно различаются, но пренебречь компонентами с малой концентрацией нельзя. Отметим, однако, что применение традиционной КД в этих случаях связано с решением жесткой системы дифференциальных уравнений.
2. Использованная подпрограмма программы SPPARKS не поддерживает параллельных вычислений. Последнее является недостатком текущей реализации программы, а не метода в целом.

### Расчет накопления дефектов в тонких пленках молибдена с помощью КД

В работе [2] изучалось накопление дефектов при трех различных скоростях генерации пар Френкеля: высокой, средней и низкой —  $G = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $G = 5 \cdot 10^{-5}$  и  $G = 5 \cdot 10^{-6}$  пар в секунду на узел решетки. Приведем результаты расчетов, полученные с теми же значениями входных параметров, что были использованы при расчетах в рамках КТСР, но теперь в рамках КД. Дополнительно к ним взяты скорости генерации кластеров различных размеров и коэффициенты диффузии различных кластеров междоузлий из табл. 3, 4 работы [2].



Зависимости поверхностной плотности видимых петель (с диаметром больше 1,3 нм) от дозы облучения для высокой, средней и низкой скоростей облучения показаны на рис. 4. Видно, что расчеты, выполненные в рамках КД, дают достаточно хорошее согласие как с экспериментом, так и с аналогичными расчетами из работы [2]. В [2] коэффициенты диффузии были подобраны так, чтобы воспроизводить эксперимент, а скорости генерации выбраны на основе расчетов методом молекулярной динамики, однако точность этих расчетов оказалась невысока. В итоге авторам [2] удалось получить хорошее согласие с экспериментом.

Расчеты авторов настоящей работы демонстрируют некоторое отличие от расчетов [2]. Возможно, это связано с отличием авторской методики от [2]: в предлагаемой модели распределение дефектов в пространстве считается однородным и используется приближение среднего поля, тогда как в [2] рассматривается зависимость концентраций от одной пространственной координаты по оси, перпендикулярной плоскости пленки, и решаются уравнения с пространственной производной. Поэтому входные параметры, хорошо подобранные в модели [2], дают несколько другие результаты в авторской модели. Отличие расчетов от эксперимента, как в настоящей работе, так и в [2], может быть связано с неточностью в определении скоростей генерации кластеров различных размеров и коэффициентов диффузии кластеров (КД чувствительна к этим параметрам).

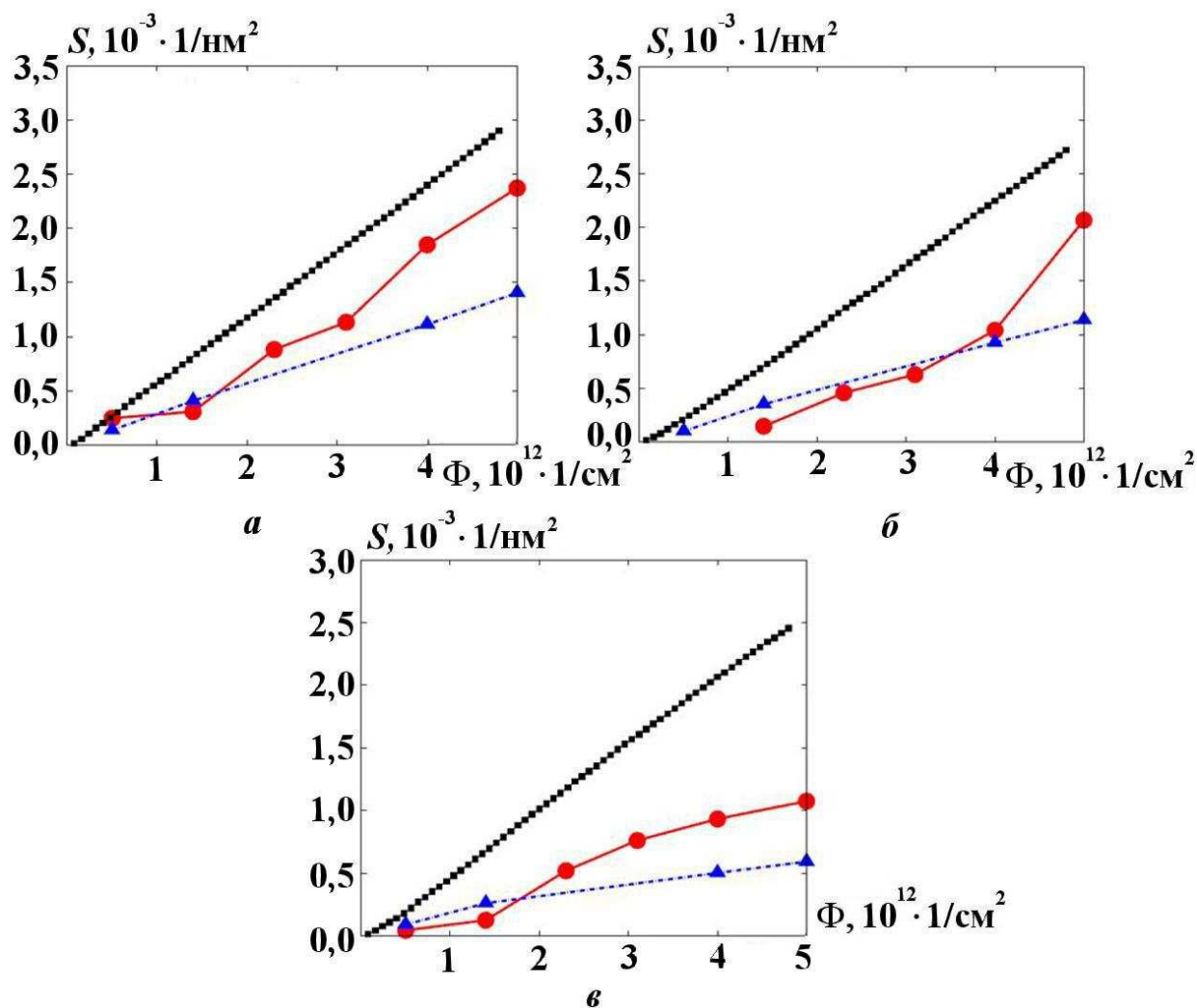


Рис. 4. Зависимость поверхностной плотности петель от дозы облучения: а — при высокой скорости облучения ( $G = 1,6 \cdot 10^{11} \text{ 1}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$ ); б — при средней скорости облучения ( $G = 1,6 \cdot 10^{10} \text{ 1}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$ ); в — при низкой скорости облучения ( $G = 1,6 \cdot 10^9 \text{ 1}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$ ); —■— — авторский расчет в рамках КД; ---▲--- — расчет из [2]; —●— — эксперимент из [2]

Рассмотрим теперь распределение междуузельных кластеров по размерам.

На рис. 5 приведены экспериментальные и расчетные данные, взятые из работы [2], для высокой скорости облучения, а также результаты расчетов из настоящей работы с теми же входными параметрами. Каждый столбец гистограммы соответствует интервалу диаметров, равному 0,5 нм. Например, первая группа столбцов (напротив деления 1,5) соответствует диаметрам  $l = 1,0 \div 1,5$  нм. На рисунке также указаны значения среднего по распределению диаметра кластеров  $l_{cp}$ . Видно, что как в настоящей работе, так и в [2] имеются различия между экспериментом и расчетами. Они могут быть связаны как с погрешностями расчетов (неточности в определении коэффициентов диффузии и скоростей генерации кластеров), так и с погрешностями эксперимента (вид гистограммы свидетельствует о, возможно, недостаточной статистике). Также отличия могут быть связаны с тем, что расчетная методика не учитывает два обстоятельства: 1) диффузия междуузельных петель может быть одномерной [10]; 2) могут существовать различные конфигурации кластеров из одного и того же числа дефектов. Последнее возможно в силу того, что энергетический барьер релаксации кластера в состоянии с минимальной энергией может быть достаточно большим. Как известно, энергия образования френкелевской пары в металлах имеет порядок нескольких электрон-вольт. При соединении двух петель, дрейфующих в перпендикулярных направлениях, возможно образование большого кластера, энергия релаксации которого может быть такого же порядка или даже больше.

Результаты авторских расчетов распределения петель по размерам для средней и низкой скоростей облучения показаны на рис. 6. Отметим, что средний диаметр петли зависит от скорости облучения немонотонно.

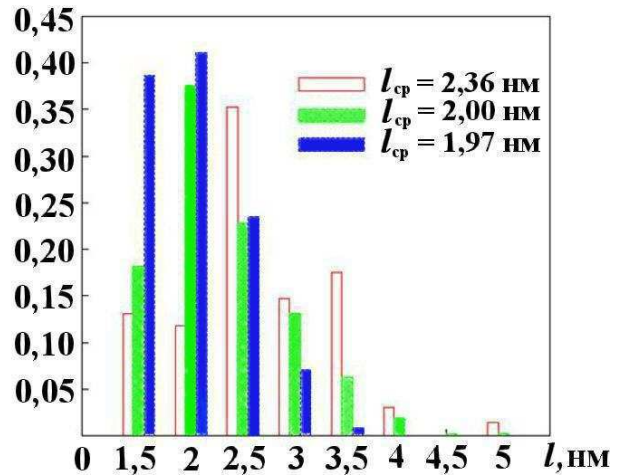


Рис. 5. Распределение (в долях) междуузельных петель по размерам при высокой скорости облучения: столбцы слева — эксперимент из [2]; в центре — расчет из [2]; справа — расчет из настоящей работы

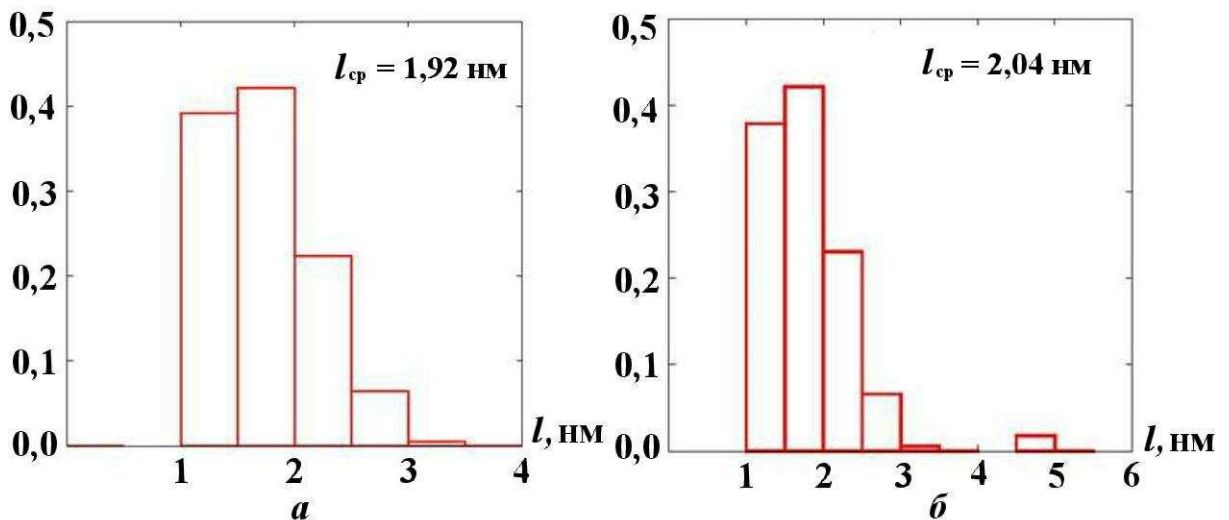


Рис. 6. Распределение (в долях) междуузельных петель по размерам при средней (а) и низкой (б) скоростях облучения при толщине пленки  $h = 72$  нм

## Заключение

Представлено два подхода к моделированию накопления радиационных дефектов в чистом молибдене: КТСР и КД. При сравнении расчетов с экспериментальными данными была выявлена ограниченность области применимости КТСР: этот подход может давать неправильные результаты в тех случаях, когда имеется генерация кластеров в каскадах и диффузия кластеров на поверхность. В подобных случаях предпочтительно использовать КД.

В случае КД получено хорошее согласие расчетов с экспериментальными и расчетными данными, приведенными в [2]. Использованный авторами стохастический подход к КД отличается от использованного в работе [2]. К преимуществам стохастического подхода относятся простота алгоритма, простота задания реакций в программе SPPARKS, а также высокая стабильность по сравнению со стандартным подходом, где решается система большого числа дифференциальных уравнений. Основным недостатком является ограниченность концентраций реагентов снизу.

После проведения моделирования накопления дефектов в тонких пленках чистого молибдена была предпринята попытка решения аналогичной задачи для чистого железа. Эксперименты по облучению пленок чистого железа, а также сплава Fe-Cr описаны в [6, 7]. Однако авторам не известны работы, в которых эти эксперименты моделировались бы с помощью КД. В связи с этим возник вопрос о значениях коэффициентов диффузии кластеров. Авторы попытались использовать значения, полученные в молекулярно-динамических расчетах в работе [10]. Но при этом оказалось, что приведенные значения коэффициентов диффузии являются завышенными. Концентрации кластеров получаются слишком низкими из-за того, что кластеры активно диффундируют на поверхность. Таким образом, в случае железа расхождение между расчетом (с коэффициентами из [10]) и экспериментом еще более сильное, чем в случае молибдена. Кроме того, значения энергий активации миграции димеждоузлий и тримеждоузлий, приведенные в [10], не находятся в согласии со значениями, полученными в DFT-расчетах в работах [3, 4]. Для димеждоузлий имеется также расхождение с классической экспериментальной работой [11].

Незавершенность ряда попыток рассчитать коэффициенты диффузии кластеров методом молекулярной динамики является известной на сегодняшний день проблемой. Можно предположить, что эта проблема связана с многообразием форм кластеров, возникающих при слиянии более мелких кластеров: кластеры с одним и тем же числом междоузлий могут иметь различные конфигурации, тогда как в молекулярно-динамических расчетах моделировались только некоторые "идеальные" (наиболее энергетически выгодные) структуры из междоузлий. Многообразие форм кластеров могло бы объяснить различия между расчетами и экспериментом как в случае железа, так и в случае молибдена (см. рис. 5). Однако учет этого многообразия в расчетах потребует существенного усложнения метода кластерной динамики.

## Список литературы

1. *Rest J., Hofman G. L.* An alternative explanation for evidence that xenon depletion, pore formation, and grain subdivision begin at different local burnups // *J. Nuclear Materials.* 2000. Vol. 277. P. 231–238.
2. *Xu D., Wirth B. D., Li M., Kirk M. A.* Combining in situ transmission electron microscopy irradiation experiments with cluster dynamics modeling to study nanoscale defect agglomeration in structural metals // *Acta Materialia.* 2012. Vol. 60. P. 4286–4302.
3. *Fu C.-C., Dalla Torre J., Willaime F. et al.* Multiscale modelling of defect kinetics in irradiated iron // *Nature Materials.* 2005. Vol. 4. P. 68–74.
4. *Dalla Torre J., Fu C.-C., Willaime F. et al.* Resistivity recovery simulations of electron-irradiated iron: Kinetic Monte Carlo versus cluster dynamics // *J. Nuclear Materials.* 2006. Vol. 352. P. 42–49.
5. *Veshchunov M. S., Shestak V. E.* Model for evolution of crystal defects in UO<sub>2</sub> under irradiation up to high burn-ups // *Ibid.* 2009. Vol. 384. P. 12–18.

6. Yao Z., Hernandez-Mayoral M., Jenkins M. L., Kirk M. A. Heavy-ion irradiations of Fe and Fe-Cr model alloys. Part 1: Damage evolution in thin-foils at lower doses // Philosophical Magazine. 2008. Vol. 88, No 21. P. 2851—2880.
7. Hernandez-Mayoral M., Yao Z., Jenkins M. L., Kirk M. A. Heavy-ion irradiations of Fe and Fe-Cr model alloys. Part 2: Damage evolution in thin-foils at higher doses // Ibid. P. 2881—2897.
8. Gillespie D. T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions // J. Physical Chemistry. 1977. Vol. 81, No 25. P. 2340—2361.
9. Plimpton S., Battaile C., Chandross M. et al. Crossing the Mesoscale No-Man's Land via Parallel Kinetic Monte Carlo. Sandia Report SAND2009-6226. October 2009.
10. Terentyev D. A., Malerba L., Hou M. Dimensionality of interstitial cluster motion in bcc-Fe // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. P. 104108.
11. Takaki S., Fuss J., Kugler H. et al. The resistivity recovery of high purity and carbon doped iron following low temperature electron irradiation // Rad. Eff. 1983. Vol. 79. P. 87—122.

Статья поступила в редакцию 02.12.14.

MODELING OF RADIATION DEFECT ACCUMULATION IN PURE MOLYBDENUM USING THE METHODS OF KINETIC THEORY AND CLUSTER DYNAMICS / M. Yu. Romashka, A. V. Yanilkin (N. L. Dukhov VNIIA, Moscow).

The modeling of radiation defect accumulation in thin pure molybdenum films under the effect of ion radiation was studied. Two approaches to the modeling were used: kinetic theory with mean cluster size and cluster dynamics. The paper reveals the limitation of the first approach applicability.

In the case of cluster dynamics the obtained results agree well both with the experiment and the calculations performed by other authors. We offer to implement a new stochastic approach to the cluster dynamics based on the SPPARKS code. The advantages and drawbacks of this approach are discussed in the paper.

*Keywords:* kinetic theory, cluster dynamics, ion irradiation, thin films, molybdenum, point defects, SPPARKS.

---

УДК 004.722

## ТОПОЛОГИЯ "МУЛЬТИТОР" ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ И УСТОЙЧИВОЙ К НЕИСПРАВНОСТЯМ КОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ С АРХИТЕКТУРОЙ СМПО-10G

В. Г. Басалов, Д. О. Козлов, А. А. Холостов  
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлено описание топологии *мультитор* для коммуникационной сети, основанной на системе межпроцессорных обменов СМПО-10G. Описаны созданные для этой топологии адаптивные маршрутные алгоритмы, позволяющие строить кратчайшие, свободные от тупиков маршруты передачи сообщений, а также обеспечивающие высокую отказоустойчивость коммуникационной сети и ее сбалансированную загрузку.

*Ключевые слова:* многопроцессорный вычислительный комплекс, коммуникационная сеть, аппаратный модуль СМПО-10GA-1, адаптерный блок СМПО-10GA-AD, коммутаторный блок СМПО-10GA-SW, адаптивные маршрутные алгоритмы, процессорный узел, виртуальный канал.

### Введение

Коммуникационная сеть (КС) высокопроизводительного многопроцессорного вычислительного комплекса (МВК) представляет собой граф, где вершинами являются вычислительные модули (ВМ), а ребрами — каналы связи. ВМ обычно содержит один или несколько процессоров, локальную память и маршрутный коммутатор. Топология КС в значительной степени определяет эффективность и стоимость самой КС и, как следствие, эффективность всего МВК. В свою очередь, на топологию КС напрямую влияет архитектура ее аппаратных средств.

КС должна передавать максимальное число сообщений за единицу времени с высокой надежностью и стоить как можно меньше. Очевидно, что разработка топологии КС — это всегда компромисс между различными противоречащими друг другу требованиями. Ниже приведены наиболее важные требования, предъявляемые к топологиям КС.

Минимизация диаметра КС и средней дистанции — основные требования к топологии КС. Дистанция — это количество каналов связи, пройденных сообщением между ВМ-источником и ВМ-приемником с использованием кратчайшего пути. Средняя дистанция — усредненное

число каналов связи, пройденных сообщениями для всех возможных пар *ВМ-источник—ВМ-приемник*. Диаметр КС — это максимальная дистанция между двумя ВМ. Уменьшение средней дистанции снижает усредненную коммуникационную задержку и занятость каналов связи и буферов, а следовательно, число конфликтов в КС.

Ширина бисекции — один из важнейших параметров топологии КС. Это показатель, определяемый как минимальное количество каналов связи, которые надо удалить из сети передачи данных для ее разделения на две несвязные области одинакового размера. От ширины бисекции во многом зависит реальная производительность КС в приложениях.

Высокая связность и соответственно устойчивость к неисправностям также важны. Связность (*connectivity*) — показатель, характеризующий наличие разных маршрутов передачи данных между узлами сети; этот показатель может быть определен, например, как минимальное количество каналов связи, которые надо удалить из сети передачи данных для ее разделения на две несвязные области. Устойчивость к неисправностям определяется наличием альтернативных путей для транспортировки сообщений в случае неисправностей коммутаторов или

каналов связи, а также в случае перегруженности каналов связи КС. Большие пакеты сообщений могут быть доставлены с большей скоростью, будучи разделенными на маленькие части и переданными по непересекающимся путям.

Топология КС должна поддерживать простую систему маршрутизации, обеспечивающую построение кратчайших маршрутов, поскольку базовые маршрутные алгоритмы реализованы в аппаратуре.

Немаловажным требованием является низкая стоимость КС. Традиционно стоимость КС определяется количеством каналов связи и количеством коммутаторов. Коммутаторы КС имеют постоянную *степень*, т. е. одинаковое количество портов. Коммутаторы с одинаковым количеством портов позволяют строить КС любого размера и более дешевы в изготовлении, что снижает цену разработки всей КС. От числа портов в коммутаторе зависят связность и средняя дистанция КС. КС с топологией *N*-мерный тор строящаяся на коммутаторах с количеством портов  $2N$ , может быть любого размера, а при топологии *гиперкуб* максимальный размер КС зависит от количества портов коммутаторов: чем больше портов в коммутаторе, тем больший размер может иметь КС. Это требование наиболее конфликтно, так как очень трудно совместимо с другими.

### Архитектура СМПО-10G

Аппаратный модуль СМПО-10GA-1 представляет собой двухкомпонентное электронное устройство, позволяющее, ориентируясь на технологии, доступные в России, использовать его как основной элемент КС высокопроизводительных вычислительных систем. Он состоит из коммутаторного блока СМПО-10GA-SW и адаптерного блока СМПО-10GA-AD [1]. Структурные схемы адаптерного и коммутаторного блоков представлены на рис. 1.

Коммутаторный блок СМПО-10GA-SW предназначен для передачи информации по КС с топологией в виде *N*-мерного тора ( $1D$ -,  $2D$ -,  $3D$ -тор). СМПО-10GA-SW разработан в виде отдельного устройства, включающего 10-портовый полноматричный коммутатор с производительностью каналов до 40 Гбит/с.

Адаптерный блок СМПО-10GA-AD предназначен для связи вычислительного узла с коммутаторным блоком. Наличие в нем 4-портового

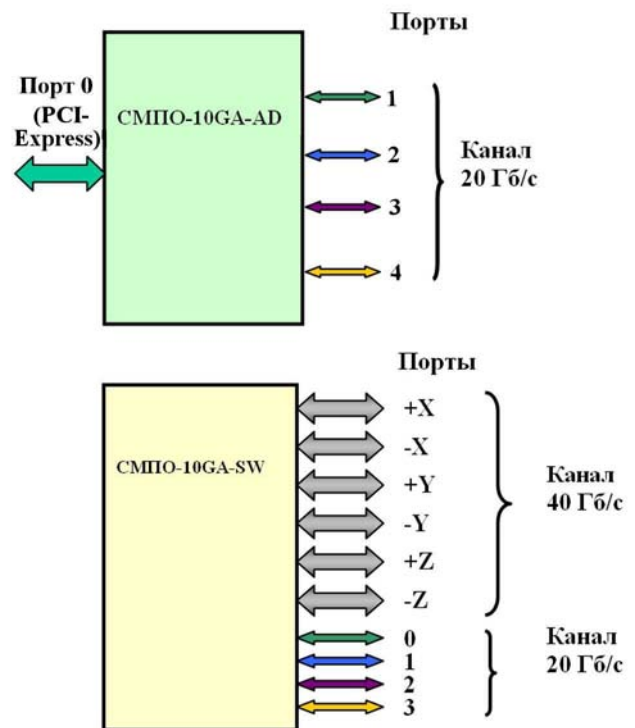


Рис. 1. Структурные схемы компонентов аппаратного модуля СМПО-10GA-1

коммутатора позволяет использовать его в качестве основного коммуникационного элемента для создания небольших систем с топологией КС в виде двумерных торов. Производительность каналов адаптера при реализации на ПЛИС составляет 20 Гбит/с, а при реализации на СБИС — 40 Гбит/с.

В настоящее время каждый порт в адаптерном блоке СМПО-10GA-AD и коммутаторном блоке СМПО-10GA-SW имеет по два виртуальных канала (VC0 и VC1). Виртуальные каналы необходимы для исключения попадания в состояние тупика (deadlock) при передаче сообщений между ВМ вычислительной системы [2].

Особенности архитектуры СМПО-10GA-1 учитывались при разработке топологии КС и маршрутных алгоритмов для достижения максимальной производительности КС и обеспечения ее устойчивости к неисправностям.

### Топология мультитор

Для создания высокопроизводительных и устойчивых к неисправностям КС МВК разработана топология *мультитор*. Базовым элементом этой топологии является процессорный узел.

Структура процессорного узла, состоящего из четырех вычислительных узлов с установленными в них адаптерными блоками СМПО-10GA-AD, объединенных через один уровень коммутации с помощью трех коммутаторных блоков СМПО-10GA-SW, представлена на рис. 2.

Каждый процессорный узел может содержать от одного до четырех коммутаторных блоков СМПО-10GA-SW (количество коммутаторных блоков в процессорном узле ограничено количеством портов в адаптерном блоке), что обеспечивает функционирование от одной до четырех подсетей с топологией *3D-тор*. Эти подсети имеют общую производительность по каждому направлению до 160 Гбит/с. Внутри одного процессорного узла коммутаторные блоки СМПО-10GA-SW не имеют непосредственной связи друг с другом. Они обеспечивают передачу сообщений между процессорными узлами, объединенными по топологии *3D-тор*. Для связи с коммутаторными блоками разных процессорных узлов каждый коммутаторный блок имеет шесть портов, названных  $+x$ ,  $+y$ ,  $+z$ ,  $-x$ ,  $-y$ ,  $-z$  и

обеспечивающих передачу сообщений в соответствующем названию порта направлении.

К каждому коммутаторному блоку одного процессорного узла может быть подключено до четырех вычислительных узлов с установленными в них адаптерными блоками СМПО-10GA-AD. Порты коммутаторных блоков, предназначенных для связи с адаптерными блоками, имеют номера 0, 1, 2, 3. Порты адаптерных блоков, связанных с коммутаторными блоками, имеют номера 1, 2, 3, 4. Порт адаптерного блока, связанный с ВМ ("PCI-Express"), имеет номер 0 (см. рис. 1). На рис. 2 показано, как должна осуществляться связь между портами коммутаторных и адаптерных блоков в процессорном узле. Порты первого коммутаторного блока, входящего в первую подсеть, подключаются к порту 1 адаптерных блоков всех вычислительных узлов, входящих в процессорный узел. Порты второго коммутаторного блока, входящего во вторую подсеть, подключаются к порту 2 адаптерных блоков всех вычислительных узлов, входящих в процессорный узел. Соответственно порты третьего и четвертого коммутаторных

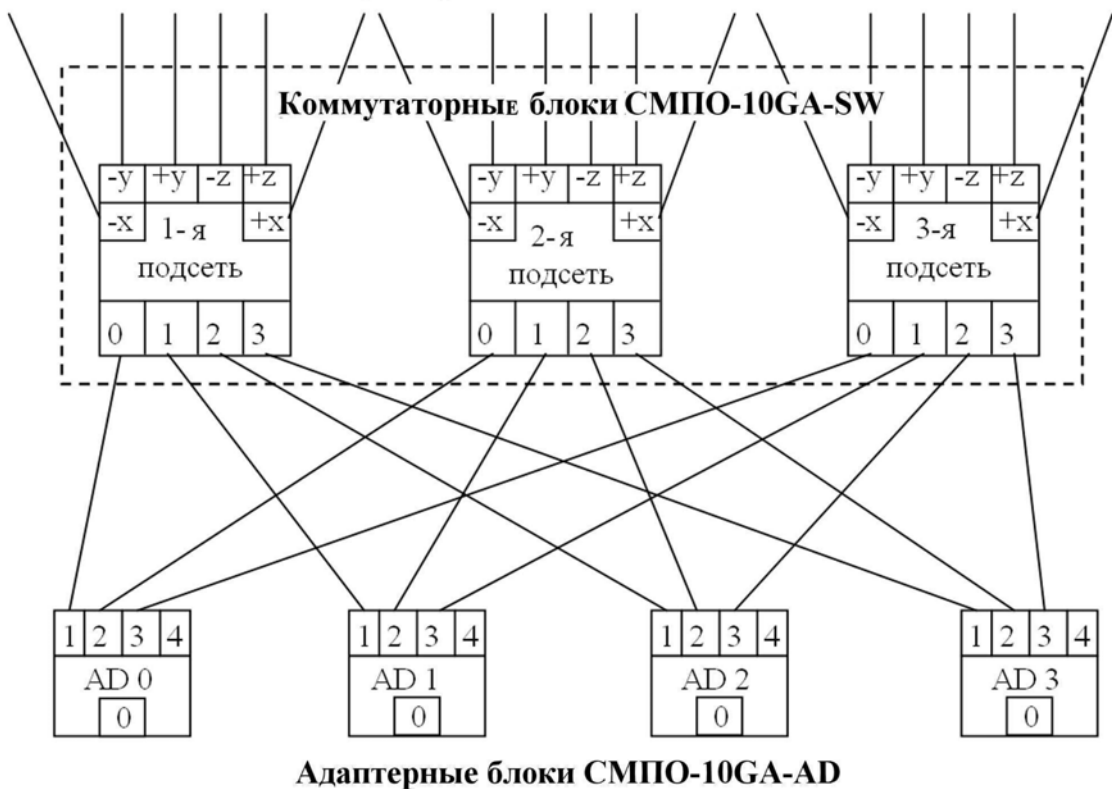


Рис. 2. Схема соединения портов процессорного узла в топологии *мультитор* третьей степени

блоков из третьей и четвертой подсетей подключаются к портам 3 и 4 адаптерных блоков.

На рис. 3 приведен пример КС МВК с топологией *мультистор* третьей степени. Это означает, что топология *мультистор* состоит из трех подсетей. Для того чтобы не загромождать рисунок, обратные связи показаны только в одном месте.

Хотя коммутаторные блоки одного процессорного узла не связаны напрямую, благодаря коммутаторам адаптерных блоков между ними можно передавать сообщения, не занимая топологические порты. Сообщение, передающееся по какой-либо подсети, в случае появления у нее неисправности может сменить подсеть и продолжить движение к получателю по другой, исправной подсети. При этом не требуется усложнения коммутаторных и адаптерных блоков в виде дополнительных виртуальных каналов, так как переход между подсетями только увеличивает длину маршрута на два транзитных участка (hops), но не создает дополнительных циклов (замкнутых путей). Возможность перехода из одной подсети в другую позволяет обойти множественные неисправности оборудования, что повышает надежность КС с топологией *мультистор*.

Размер идентификаторов узлов КС СМПО-10G составляет четыре байта. При использо-

вании топологии *мультистор* коммутаторные и адаптерные блоки имеют разную идентификацию. Форматы этих идентификаторов приведены на рис. 4.

Идентификаторы всех коммутаторных блоков одного процессорного узла идентичны, они занимают три байта (четвертый байт зарезервирован), которые содержат трехмерную координату этого процессорного узла.

Идентификаторы адаптерных боков занимают четыре байта. Первые три байта определяют координату процессорного узла, к которому относится адаптерный блок, а два младших бита четвертого байта — номер адаптерного блока в процессорном узле.

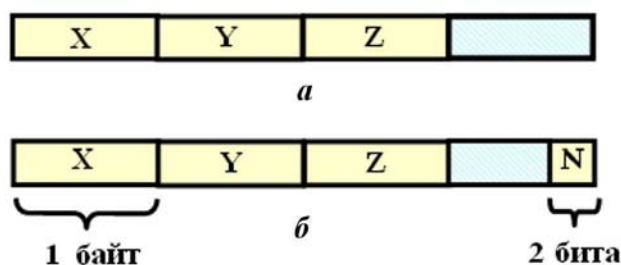


Рис. 4. Форматы идентификаторов коммутаторного (а) и адаптерного (б) блоков аппаратного модуля СМПО-10GA-1

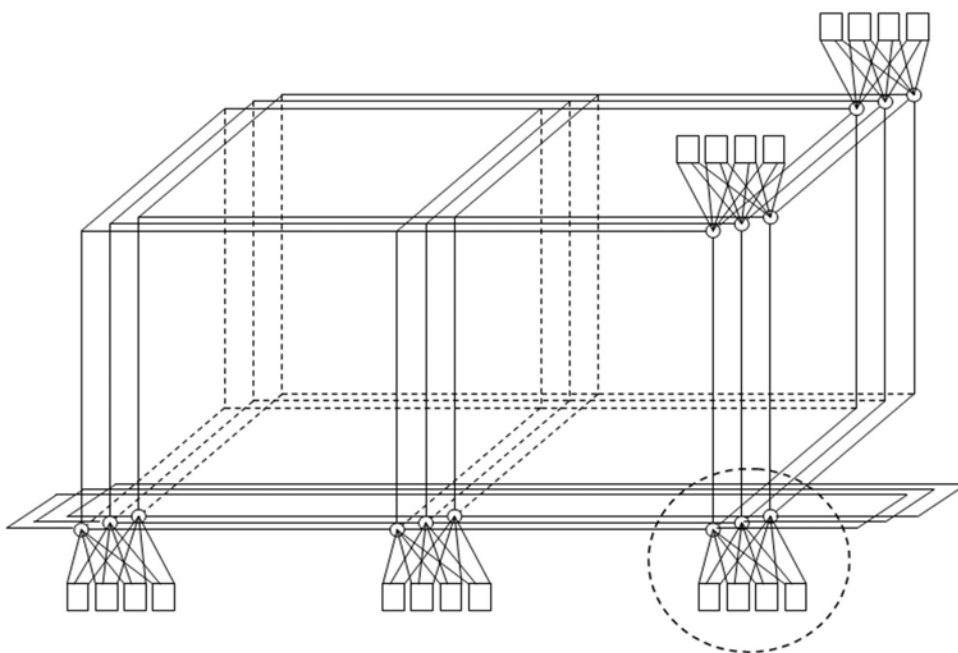


Рис. 3. Топология *мультистор* третьей степени на основе архитектуры СМПО-10GA-1



## Адаптивный метод выбора оптимального маршрута сообщения

Идея этого метода заключается в том, что вычисление оптимального выходного порта для передачи каждого транзитного информационного сообщения осуществляется коммутатором непосредственно в момент передачи [3].

Наиболее перспективным направлением при создании маршрутных алгоритмов для КС СМПО-10G с топологией *мультитор* является объединение возможностей двух механизмов: детерминированного при полностью исправной коммуникационной среде в виде  $n$ -мерного тора и адаптивного при возникновении неисправностей. Это позволит наиболее полно использовать сильные стороны каждого механизма и увеличить надежность и производительность КС с топологией *мультитор*, создаваемых на базе СМПО-10G.

Разработка маршрутных алгоритмов для архитектуры СМПО-10G осложняется ее особенностями, в частности тем, что аппаратный модуль СМПО-10GA-1 представляет собой двухкомпонентное электронное устройство. Маршрутные алгоритмы для разных устройств должны совместно обеспечивать правильную и надежную работу всей КС.

### Адаптивный маршрутный алгоритм коммутатора адаптерного блока

В адаптерном блоке для разных портов коммутатора разработаны разные маршрутные алгоритмы. Это сделано с целью увеличения пропускной способности и повышения надежности КС в целом.

Отправка пакетов сообщений, источником которых является ВМ, т. е. порт "PCI-Express" адаптера, осуществляется циклически через все функционирующие порты адаптера; при этом всегда выбирается виртуальный канал VC0. В результате пакеты равномерно распределяются по коммуникационным подсетям, обеспечивая сбалансированную загрузку всей КС.

Для принятия решения о маршрутизации пакета в портах 1, 2, 3, 4 адаптер сравнивает идентификатор получателя  $\{X_D, Y_D, Z_D, N_D\}$  с идентификатором текущей адаптерной платы  $\{X_C, Y_C, Z_C, N_C\}$ . Сравнение производится вычитанием значений полей  $\{X_D, Y_D, Z_D, N_D\}$  из значений полей  $\{X_C, Y_C, Z_C, N_C\}$ .

Если  $\{X_D, Y_D, Z_D, N_D\}$  и  $\{X_C, Y_C, Z_C, N_C\}$  совпали, пакет передается в порт "PCI-Express", а затем в узел. В противном случае коммутатор адаптерной платы выдает пакет в порт со смещением 1 от номера текущего порта (например: текущий порт 1, искомый — 2; текущий порт 2, искомый — 3; текущий порт 4, искомый — 1). Если найденный выходной порт не способен передавать пакеты, то коммутатор адаптерной платы выдает пакет в порт со смещением 2 от номера текущего порта (например: текущий порт 1, искомый — 3; текущий порт 2, искомый — 4; текущий порт 3, искомый — 1). Если и этот порт нерабочий, то делается вывод о неисправности сети. Для передачи пакета используется виртуальный канал VC1.

### Адаптивный маршрутный алгоритм коммутатора коммутаторного блока

Адаптивный маршрутный алгоритм коммутатора коммутаторного блока одинаков для всех его портов.

Для принятия решения о маршрутизации пакета коммутатор коммутаторной платы (СМПО-10GA-SW) сравнивает идентификатор получателя  $\{X_D, Y_D, Z_D\}$  с идентификатором текущей коммутаторной платы  $\{X_C, Y_C, Z_C\}$ . Сравнение производится вычитанием значений полей  $\{X_D, Y_D, Z_D\}$  из значений полей  $\{X_C, Y_C, Z_C\}$ .

Если  $\{X_D, Y_D, Z_D\}$  и  $\{X_C, Y_C, Z_C\}$  совпали, пакет передается в порт с номером  $N_D$  и виртуальным каналом VC0. Если передача пакета в порт с номером  $N_D$  невозможна, то выбирается первый способный к передаче пакетов порт с виртуальным каналом VC1, ведущий в адаптерные блоки (порты 1, 2, 3, 4). Если такого нет, то делается вывод о неисправности сети.

Если  $\{X_D, Y_D, Z_D\}$  и  $\{X_C, Y_C, Z_C\}$  не совпали, для передачи пакета выбирается оптимальный выходной порт и виртуальный канал, ведущий в следующий коммутаторный блок. В случае, если передача пакета через выбранный выходной порт невозможна, выбирается первый способный к передаче пакетов порт с виртуальным каналом VC1, ведущий в адаптерные блоки (порты 1, 2, 3, 4). Если такого нет, то делается вывод о неисправности сети.

Топологии *мультитор* присуще наличие большого количества замкнутых участков сети (циклов), приводящих к возможности возникновения состояний *взаимных блокировок* при

обмене сообщениями. Выбор оптимального выходного порта в алгоритме коммутатора коммутаторного блока осуществляется в соответствии с хорошо известным алгоритмом DOR (Dimension Order Routing), или, как его еще называют, XY-routing алгоритмом [4]. Изменение измерений при прохождении пакетом сообщения маршрута происходит в фиксированном порядке: пакет сначала направляется до соответствующей координаты в  $X$ -измерении в положительном или отрицательном направлении, затем обрабатывается измерение  $Y$  и в конце — измерение  $Z$ .

Использование имеющегося разделения каждого физического канала на два виртуальных канала со своими буферными пространствами позволяет исключить в топологии *мультитор* циклы, образованные обратной связью. Применение двух виртуальных каналов разделяет коммуникационную среду на две виртуальных КС с ациклическими графами зависимостей каналов. Если в маршруте между источником и приемником пакета используется обратная связь, то пакет передается по виртуальному каналу VC0, если обратная связь не задействована — по VC1. Смена виртуальных каналов происходит при прохождении сообщением коммутатора с нулевым значением координаты в каждом измерении топологии *мультитор*.

Граф зависимостей каналов, получающийся в результате работы маршрутного алгоритма коммутатора коммутаторного блока, не содержит циклов. Поэтому возможность возникновения состояний взаимных блокировок исключается.

Высокая отказоустойчивость обеспечивается обходом неисправных участков КС через коммутаторы адаптерных блоков со сменой подсети. При этом увеличивается длина маршрута, но не образуются дополнительных циклов.

### Характеристики КС с топологией *мультитор*

Количество процессорных узлов в МВК, использующем КС с топологией *мультитор*, определяется по формуле

$$NPU = \prod_{i=1}^k z_i,$$

где  $k$  — количество измерений (размерность) тора,  $1 \leq k \leq 3$ ;  $z_i$  — количество процессорных узлов в  $i$ -м измерении тора.

МВК содержит  $N$  ВМ и соответственно  $N$  адаптерных блоков СМПО-10GA-AD, количество которых определяется по формуле

$$N = m \cdot NPU,$$

где  $m$  — количество ВМ в каждом процессорном узле,  $m \leq 4$ .

Количество задействованных при этом коммутаторных блоков СМПО-10GA-SW можно определить по формуле

$$SW = s \cdot NPU,$$

где  $s$  — степень топологии *мультитор*,  $1 \leq s \leq 4$ .

Поскольку топология *мультитор* образована на основе трехмерного тора, уместно предположить, что главной составляющей диаметра КС будет диаметр тора. К этому диаметру необходимо добавить два транзитных канала связи: первый — от адаптерного блока источника сообщения до смежного коммутаторного блока, второй — от коммутаторного блока до адаптерного блока приемника сообщения. Полный диаметр КС с топологией *мультитор* определяется по формуле

$$D = \sum_{i=1}^k \left( \frac{z_i}{2} \right) + 2.$$

Стоит также отметить, что минимальная дистанция в топологии *мультитор* равна 2.

Значение связности для топологии *мультитор* равно  $s$ . Оно определяется количеством связей между адаптерным блоком СМПО-10GA-AD ВМ и коммутаторными блоками СМПО-10GA-SW одного процессорного узла.

Ширина бисекции для обычного трехмерного тора определяется по формуле

$$BW_{tor} = 2 \min(z_1 z_2, z_1 z_3, z_2 z_3).$$

В топологии *мультитор* между процессорными узлами используется по  $s$  связей, поэтому ширина бисекции для них будет больше в  $s$  раз:

$$BW = s \cdot BW_{tor}.$$

Легко заметить, что ширина бисекции в топологии *мультитор* увеличивается с увеличением ее степени.

Стоимость — показатель, который может быть определен, например, как общее количество линий передачи данных в МВК. Стоимость обычного тора можно оценить по формуле

$$COST_{tor} = k \prod_{i=1}^k z_i.$$

Для вычисления стоимости топологии *мульти-тор* необходимо  $COST_{tor}$  увеличить в  $s$  раз — используемую степень данной топологии — и прибавить стоимость древовидной составляющей (с количеством связей между адаптерными и коммутаторными блоками всех процессорных узлов), вычисляемую по формуле

$$COST_{tree} = ms \prod_{i=1}^k z_i.$$

В итоге стоимость топологии *мультитор* равна

$$COST = s \cdot COST_{tor} + COST_{tree}.$$

Отсюда следует, что стоимость топологии *мультитор* увеличивается с увеличением ее степени.

Устойчивость к неисправностям — способность КС функционировать при наличии одной или более неисправностей. Система маршрутизации КС с топологией *мультитор* неустойчива к неисправностям, когда ее степень равна 1. Устойчивость к неисправностям повышается с увеличением степени  $s$  топологии *мультитор*. Это достигается за счет увеличения количества альтернативных маршрутов и реализации адаптивных маршрутных алгоритмов, обеспечивающих обход неисправных участков.

### Моделирование топологий КС

Авторами проведено моделирование двух топологий КС: *4D-тор* (используемой при создании высокоскоростной сети "Ангара" [5], разработанной в ОАО "НИЦЭВТ", г. Москва) и *мультитор* с разным количеством подсетей, от одной до трех. Количество ВМ в моделируемых вычислительных системах достигает 4096 и ограничено возможностями используемого программного обеспечения и оборудования. Моделирование проводилось с использованием открытой программы Booksim [4], дополненной топологией *мультитор* и соответствующими маршрутными алгоритмами. Программа Booksim разработана в Стэнфордском технологическом университете и представляет собой консольное приложение для моделирования трафика вычислительных сетей.

На основе входных параметров Booksim выводит информацию о средней коммуникационной задержке доставки пакета сообщения в сети и среднем количестве транзитных участков.

К входным параметрам моделирования относятся: параметры расширения топологии; функция трафика, задающая распределение для генерации номера источника и приемника для пакетов; функция маршрутизации; интенсивность внедрения информационного потока. Средняя коммуникационная задержка измеряется циклами (итерациями) выполнения программы Booksim. На одном цикле происходит создание пакетов, внедрение их в сеть, продвижение через выходные каналы коммутаторов и, если пакеты были доставлены до адресата, их извлечение из сети. Коммуникационной задержкой одного пакета сообщения считается количество циклов выполнения программы, которое данный пакет находил в сети, с момента его создания до момента его извлечения. Средняя коммуникационная задержка получается путем вычисления среднего арифметического задержек всех сгенерированных пакетов. По аналогии рассчитывается среднее количество транзитных участков.

В ходе каждого эксперимента авторы изменяли параметр расширения топологии, а именно параметр  $K$  — количество узлов сети в каждом измерении топологий *4D-тор* и *мультитор*, и получали результаты моделирования для сетей с разным количеством ВМ. Неизменными оставались параметры функции маршрутизации и трафика. Интенсивность внедрения пакетов в сеть была выбрана на уровне 50%. Интенсивность внедрения пакетов — это параметр, определяющий количество пакетов, которые будут создаваться на одном цикле моделирования. Если значение данного параметра равно 50%, это означает, что на одном цикле моделирования число созданных пакетов составит ровно половину от количества ВМ в МВК. Функция маршрутизации представлена алгоритмом Dimension Order Routing [6], а функция трафика — нормальным распределением для каждого генерируемого пакета.

На рис. 5 показаны результаты моделирования средней дистанции для топологий *4D-тор* и *мультитор* в зависимости от числа ВМ в МВК\*. Средняя дистанция для топологии *мультитор* при разном числе подсетей одинакова, и, как видно из рисунка, она больше, чем средняя дистанция для топологии *4D-тор*. Стоит отметить, что результаты моделирования средней дистан-

\*При моделировании топологии *4D-тор* использовалась модель, в которой коммутатор и адаптер ВМ совмещены, т. е. минимальная дистанция равна 1.

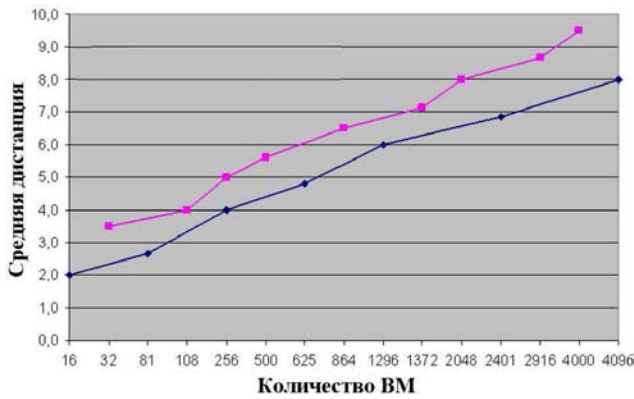


Рис. 5. Зависимости средней дистанции от количества узлов для топологий  $4D$ -тор (—◆—) и мультитор с одной подсетью (—■—)

ции для этих топологий полностью совпали с расчетами, проведенными по формуле из [4]:

$$H_{\min} = \frac{1}{N^2} \sum_{x,y \in N} H(x,y),$$

где  $N$  — количество VM в МВК;  $H(x,y)$  — дистанции между всеми парами VM в МВК.

На рис. 6 (см. также цветную вкладку) приведены результаты моделирования зависимости средней коммуникационной задержки от количества VM МВК для топологий  $4D$ -тор и мультитор с одной, двумя и тремя подсетями. Из рисунка видно, что средняя задержка для топологии  $4D$ -тор меньше, чем для топологии мультитор с одной подсетью, но больше, чем для топологии мультитор с двумя и тремя подсетями. Также можно заметить, что при интенсивности внедрения пакетов в сеть на уровне 50% применение топологии мультитор с тремя подсетями практически не уменьшает средней задержки по сравнению с топологией мультитор с двумя подсетями.

Средняя задержка доставки пакета для топологии мультитор с тремя подсетями становится заметно меньше по сравнению с топологией мультитор с двумя подсетями при большей загрузке КС. Это хорошо видно из рис. 7, который отображает результаты моделирования при интенсивности внедрения пакетов на уровне 99%.

### Заключение

Разработаны новая топология мультитор, а также адаптивные маршрутные алгоритмы ком-

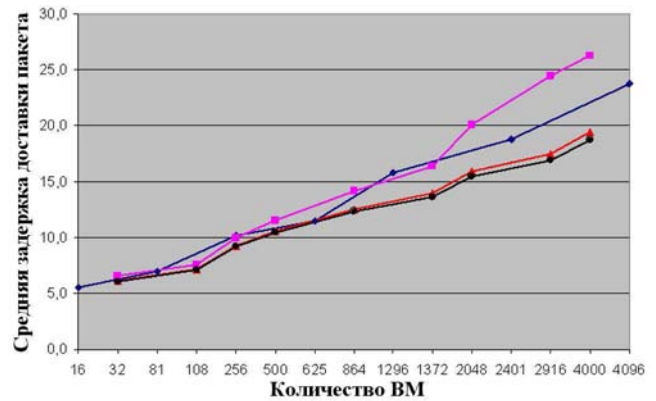


Рис. 6. Зависимости средней коммуникационной задержки от количества узлов для топологий  $4D$ -тор (—◆—) и мультитор с одной (—■—), двумя (—▲—) и тремя (—●—) подсетями

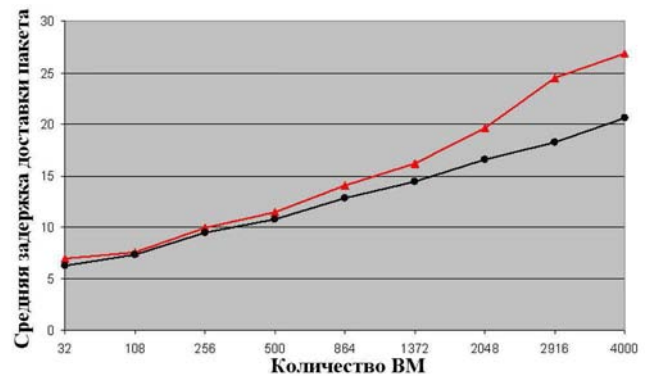


Рис. 7. Зависимости средней коммуникационной задержки от количества узлов для топологий мультитор с двумя (—▲—) и тремя (—●—) подсетями при интенсивности внедрения пакетов  $\sim 99\%$

мутаторов адаптерных и коммутаторных блоков для КС на базе системы межпроцессорных обменов СМПО-10G, которые обеспечивают ее устойчивое к неисправностям функционирование.

На базе КС СМПО-10G с топологией мультитор третьей степени и описанными в статье маршрутными алгоритмами создан МВК МП-СМПО-3D, объединяющий 64 VM (768 ядер). Полученная производительность 7,5 Тфлопс на тесте Linpack составила 79,4% относительно пиковой производительности 9,4 Тфлопс.

К достоинствам предложенной топологии мультитор и разработанных для нее маршрутных алгоритмов относятся:

- устойчивость (при  $s > 1$ ) к деградации КС;
- хорошая геометрическая масштабируемость МВК, имеющих КС с данной топологией;

— увеличение производительности КС за счет передачи пакетов данных от источника к приемнику параллельно по  $s > 1$  независимым путям.

Недостаток топологии *мультитор* традиционен для тороидальных топологий: это большой диаметр КС и небольшая ширина бисекции.

Дальнейшее направление работ — разработка и применение для аппаратного модуля СМПО-10GA-1 новых топологий и маршрутных алгоритмов, которые позволят строить более эффективные КС.

### Список литературы

1. Холостов А. А. Масштабируемая система межпроцессорных обменов 10G // Второй национальный суперкомпьютерный форум. г. Переславль-Залесский, 26—29 ноября 2013 г.
2. Duato J. A theory of fault-tolerant routing in wormhole networks // IEEE Trans. Parallel and Distributed System. 1997. Vol. 8, No 8. P. 790—802.
3. Басалов В. Г., Вялухин В. М. Адаптивная система маршрутизации для отечественной системы межпроцессорных обменов СМПО-10G // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 3. С. 64—70.
4. Dally W., Towles B. Principles and Practices of Interconnection Networks. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers, 2004.
5. Жабин И., Макагон Д., Симонов А. и др. Кристалл для "Ангара" // Суперкомпьютеры. 2013. № 4 (16). С. 46—49.
6. Khan M. A., Ansari A. Q. A Quadrant-XYZ Routing Algorithm for 3-D Asymmetric Torus Network-on-Chip. The Research Bulletin of Jordan ACM. 2011. Vol. II. <http://www.ijj.acm.org/volum2/no2/ijjvol2no2p2.pdf>

Статья поступила в редакцию 11.12.14.

MULTITORUS TOPOLOGY FOR HIGH PERFORMANCE AND FAULT-SAFE COMMUNICATION NETWORK WITH THE SMPO-10G ARCHITECHTURE / V. G. Basalov, D. O. Kozlov, A. A. Kholostov (FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov, Nizhny Novgorod region).

The paper considers the multitorus topology for the communication network based on the system of itnerprocessor exchanges SMPO-10G. The paper describes the adaptive routing algorithms developed specially for this topology, which enable building the shortest and free-from-dead-ends message transmission routs, as well as providing high fault tolerance of the communication network and its balanced load.

*Keywords:* multiprocessor computation complex, communication network, SMPO-10GA-1 hardware module, СМПО-10GA-AD adapter unit, СМПО-10GA-SW switch unit, adaptive routing algorithms, processor node, virtual channel.

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**Басалов Владимир Геннадиевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: bav@md08.vniief.ru

**Денисова Оксана Владимировна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: o\_denisova@itmf.vniief.ru

**Козелков Андрей Сергеевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: A.S.Kozelkov@vniief.ru

**Козлов Дмитрий Олегович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, инженер-программист, *e-mail*: D.O.Kozlov@itmf.vniief.ru

**Лашкин Сергей Викторович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской группы, *e-mail*: S.V.Lashkin@itmf.vniief.ru

**Львова Светлана Сергеевна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: ssl@vniief.ru

**Ромашка Михаил Юрьевич** — ВНИИА им. Н. Л. Духова, г. Москва, старший научный сотрудник, *e-mail*: michaelromashka@gmail.com

**Мелешкина Дарья Павловна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, математик, *e-mail*: D.P.Rubtsova@itmf.vniief.ru

**Сизова Мария Александровна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: sizova@md08.vniief.ru

**Соболев Игорь Вадимович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: I.V.Sobolev@vniief.ru

**Тарасова Наталья Владимировна** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: tara@vniief.ru

**Холостов Алексей Александрович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательского отдела, *e-mail*: haa@vniief.ru

**Шемарулин Валерий Евгеньевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: shemarulin@vniief.ru

**Шурыгин Александр Владимирович** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: A.V.Shurygin@itmf.vniief.ru

**Янилкин Алексей Витальевич** — ВНИИА им. Н. Л. Духова, г. Москва, начальник лаборатории, *e-mail*: aleyanilkin@gmail.com

**Янилкин Юрий Васильевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательского отдела, *e-mail*: yan@md08.vniief.ru

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

**Бондаренко Ю. А.** Влияние способа учета теплопроводности на устойчивость счета двухэтапной газодинамической разностной схемы . . . . . 3

*Тарасова Н. В., Козелков А. С., Мелешкина Д. П., Лашкин С. В., Денисова О. В., Сизова М. А.* Особенности применения алгоритма SIMPLE для расчета сжимаемых течений . . . . . 20

*Соболев И. В., Шурыгин А. В.* Сшивание многогранных неструктурированных секток в методике ТИМ-3D . . . . . 35

*Шемарулин В. Е., Львова С. С., Янилкин Ю. В.* Об одном режиме разлета в вакуум плоского слоя идеального газа . . . . . 46

*Ромашка М. Ю., Янилкин А. В.* Моделирование накопления радиационных дефектов в чистом молибдене методами кинетической теории и кластерной динамики . . . . . 64

*Басалов В. Г., Козлов Д. О., Холостов А. А.* Топология "мультистор" для высокопроизводительной и устойчивой к неисправностям коммуникационной сети с архитектурой СМПО-10G . . . . . 76

Сведения об авторах . . . . . 85

**Bondarenko Yu. A.** Effect of the way to account for heat transfer on the calculation stability of two-phase gas-dynamic difference scheme . . . . . 3

*Tarasova N. V., Kozelkov A. S., Meleshkina D. P., Lashkin A. V., Denisova O. V., Sizova M. A.* Specifics of the SIMPLE algorithm application for the calculation of incompressible flows . . . . . 20

*Sobolev I. V., Shurygin A. V.* Seaming polygonal unstructured grids in the TIM-3D technique . . . . . 35

*Shemarulin V. E., L'vova S. S., Yanilkin Yu. V.* On a mode of ideal gas planar layer expansion into vacuum . . . . . 46

*Romashka M. Yu., Yanilkin A. V.* Modeling of radiation defect accumulation in pure molybdenum using the methods of kinetic theory and cluster dynamics . . . . . 64

*Basalov V. G., Kozlov D. O., Kholostov A. A.* Multitorus topology for high performance and fault-safe communication network with the SMPO-10G architecture . . . . . 76

Information about authors . . . . . 85

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Н. Ю. Зимакова,  
Е. Н. Старченко

Корректор А. В. Федоренко

---

Подписано в печать 06.08.15  
Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 11 Формат 60×84/8  
Тираж 1000 экз. Зак. тип. 2182-2012 Уч.-изд. л. ~ 13  
6 статей

---

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

---

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

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



## ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате .doc (WinWord).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);

2) разрешение на открытое опубликование от организации, в которой выполнена работа.

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны соответствовать указанным в представленной рукописи.

Необходимо также сообщить полные имена и отчества, должности и электронные адреса авторов и обязательно указать номер телефона и/или e-mail для обратной связи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием необходимо указать УДК. Разделы и подразделы статьи должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, соответствующее стандартам по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например,  $a$  и  $\alpha$  ("альфа"),  $v$  и  $\nu$  ("ню"),  $s$  и  $S$ ) желательны делать соответствующие пометки.

Векторные величины необходимо выделять жирным шрифтом или отмечать стрелкой.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисовочные подписи. Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют символьными (цифровыми) обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисовочной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы (отчеты) не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАНТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail: [sokol@vniief.ru](mailto:sokol@vniief.ru)

В случае несоблюдения указанных правил редакция журнала оставляет за собой право задержать публикацию или отклонить ее без рассмотрения.

**Плата за публикацию с авторов не взимается.**

**При принятии статьи к публикации права на ее использование переходят к издателю.**

УДК 519.6+533.6

ВЛИЯНИЕ СПОСОБА УЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА УСТОЙЧИВОСТЬ СЧЕТА ДВУХЭТАПНОЙ ГАЗОДИНАМИЧЕСКОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ / Ю. А. Бондаренко // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 3. С. 3—19.

Проведено с учетом теплопроводности исследование устойчивости двухэтапной разностной схемы счета газовой динамики в переменных Лангранжа. Получено, что условия на шаг по времени типа Куранта сильно зависят от способа использования в разностной схеме неявной теплопроводности. В большинстве случаев условие устойчивости определяется изэнтропической скоростью звука. Предложена модификация с учетом неявной теплопроводности в двух уравнениях энергии. В условиях устойчивости модифицированной схемы присутствует непрерывный переход от изэнтропической скорости звука к изотермической при увеличении теплового числа Куранта.

Изотермическая скорость звука всегда меньше изэнтропической, а при учете давления излучения в случае низких плотностей и высоких температур она может быть меньше изэнтропической в десятки и сотни раз. Поэтому в модифицированной схеме шаг по времени при большом тепловом числе Куранта может заметно увеличиться (рис. 4, список лит. — 17 назв.).

*Ключевые слова:* газовая динамика с теплопроводностью, разностные схемы, расщепление по физическим процессам, устойчивость разностных схем, изэнтропическая скорость звука, изотермическая скорость звука, тепловая дисперсия звука.

УДК 519.6

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ АЛГОРИТМА SIMPLE ДЛЯ РАСЧЕТА СЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЙ / Н. В. Тарасова, А. С. Козелков, Д. П. Мелешкина, С. В. Лашкин, О. В. Денисова, М. А. Сизова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 3. С. 20—34.

Данная работа посвящена описанию модификации алгоритма SIMPLE для случая сжимаемых течений и исследованию применимости реализованного алгоритма для расчета трансзвуковых сжимаемых течений в рамках пакета программ ЛОГОС. На примере задач обтекания крылового профиля и течения внутри диффузора демонстрируются возможности реализованного алгоритма по достижению приемлемой точности и скорости сходимости при использовании различных схем дискретизации конвективного слагаемого и изменении других счетных параметров. Полученные результаты сравниваются с данными известных экспериментальных тестов (рис. 17, табл. 4, список лит. — 18 назв.).

*Ключевые слова:* алгоритм SIMPLE, сжимаемые трансзвуковые течения, схемы дискретизации конвективного слагаемого, пакет программ ЛОГОС.

УДК 519.6

СШИВАНИЕ МНОГОГРАННЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК В МЕТОДИКЕ "ТИМ-3D" / И. В. Соболев, А. В. Шурыгин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 3. С. 35—45.

Дается описание алгоритма, реализующего метод сшивания многогранных неструктурированных сеток. Данный метод реализован в программе расчета начальных данных методики ТИМ-3D. Применимость метода продемонстрирована на примерах сшивания различных типов сеток в единую счетную сетку области. Проведено исследование быстродействия алгоритма, выполняющего сшивание трехмерных сеток (рис. 18, табл. 3, список лит. — 8 назв.).

*Ключевые слова:* методика ТИМ-3D, неструктурированные многогранные сетки, метод сшивания, ТИМ-РНД, ЛОГОС-Препост.

УДК 517.95+514.86

ОБ ОДНОМ РЕЖИМЕ РАЗЛЕТА В ВАКУУМ ПЛОСКОГО СЛОЯ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА / В. Е. Шемарулин, С. С. Львова, Ю. В. Янилкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 3. С. 46—63.

Найден и подробно исследован класс точных решений уравнений одномерной газовой динамики, описывающих изэнтропический разлет в вакуум идеального газа, заполняющего плоский слой конечной толщины, в случае специальным образом заданных начальных распределений газодинамических параметров при показателе адиабаты, равном 3.

В качестве примера рассмотрен частный случай, когда начальная скорость газа равна нулю, а начальная плотность распределена по квадратичному закону и обращается в нуль на границе с вакуумом. Отмечены характерные особенности решения и его связь с полиномами Лежандра. Полученное частное решение может быть использовано для тестирования методик и программ, предназначенных для численного решения задач газовой динамики. При использовании данного решения в качестве теста можно проверить следующие особенности численного метода: степень сохранения энтропии в изэнтропических течениях, качество описания течений в окрестностях слабых и сильных разрывов и на границах с вакуумом. Дополнительную информацию о точности численного метода может дать проверка выполнения в численном решении основных качественных свойств точного решения: неподвижность звуковых точек (точек слабого разрыва), неподвижность границ течения до известного момента времени, движение линий вакуума (кривых градиентных катастроф) согласно известному закону.

Приведены результаты численного решения рассмотренной задачи по методике ЭГАК (рис. 10, табл. 1, список лит. — 9 назв.).

*Ключевые слова:* уравнения одномерной газовой динамики, идеальный газ, изэнтропический разлет в вакуум, точные решения, численное решение.

УДК 538.911

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАКОПЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ЧИСТОМ МОЛИБДЕНЕ МЕТОДАМИ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ И КЛАСТЕРНОЙ ДИНАМИКИ / М. Ю. Ромашка, А. В. Янилкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 3. С. 64—75.

Проведено моделирование накопления радиационных дефектов в тонких пленках чистого молибдена под действием ионного облучения. Использованы два подхода к моделированию: кинетическая теория со средними размерами кластеров и кластерная динамика.

Обсуждается ограниченность области применимости первого подхода. Он может быть неприменим в случаях, когда имеется генерация кластеров дефектов в каскадах смещений атомов и диффузия кластеров на стоки, такие как поверхность, межзеренные границы и дислокации. Это связано с невозможностью учесть распределение кластеров по размерам в рамках кинетической теории и присвоить каждому размеру кластеров свой коэффициент диффузии.

В случае кластерной динамики полученные результаты находятся в хорошем согласии как с экспериментом, так и с расчетами других авторов. При этом предлагаемый способ реализации кластерной динамики отличается от использованных ранее подходов: реализован стохастический подход к кластерной динамике на основе кода SPARKS. К преимуществам стохастического подхода относятся простота алгоритма, простота задания реакций в программе SPARKS, а также высокая стабильность по сравнению со стандартным подходом, где решается система большого числа дифференциальных уравнений. Основным недостатком является ограниченность концентраций реагентов снизу (рис. 6, список лит. — 11 назв.)

*Ключевые слова:* кинетическая теория, кластерная динамика, ионное облучение, тонкие пленки, молибден, точечные дефекты, SPARKS.

УДК 004.722

ТОПОЛОГИЯ "МУЛЬТИТОР" ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ И УСТОЙЧИВОЙ К НЕИСПРАВНОСТЯМ КОММУНИКАЦИОННОЙ СЕТИ С АРХИТЕКТУРОЙ СМПО-10G / В. Г. Басалов, Д. О. Козлов, А. А. Холостов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2015. Вып. 3. С. 76—84.

Представлено описание топологии *мультитор* для коммуникационной сети, основанной на системе межпроцессорных обменов СМПО-10G. Описаны созданные для этой топологии адаптивные маршрутные алгоритмы, позволяющие строить кратчайшие, свободные от тупиков маршруты передачи сообщений, а также обеспечивающие высокую отказоустойчивость коммуникационной сети и ее сбалансированную загрузку (рис. 7, список лит. — 6 назв.).

*Ключевые слова:* многопроцессорный вычислительный комплекс, коммуникационная сеть, аппаратный модуль СМПО-10GA-1, адаптерный блок СМПО-10GA-AD, коммутаторный блок СМПО-10GA-SW, адаптивные маршрутные алгоритмы, процессорный узел, виртуальный канал.

EFFECT OF THE WAY TO ACCOUNT FOR HEAT TRANSFER ON THE CALCULATION STABILITY OF TWO-PHASE GAS-DYNAMIC DIFFERENCE SCHEME / Yu. A. Bondarenko // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 3. P. 3—19.

The two-phase difference gas-dynamic scheme in Lagrangian variables is studied with account for heat transfer. We have discovered that the conditions for the Courant-type time-step strongly depend on the way the implicit heat conductivity is used in the difference scheme. In major cases the condition of stability is determined by the isentropic speed of sound. We offer a modification with account for the implicit heat conductivity in two energy equations. Continuous transition from the isentropic speed of sound to the isothermal one at the Courant thermal number increase is present in the conditions of the modified scheme stability. The isothermal speed of sound is always less than the isentropic one, and when the radiation pressure is taken into account in the case of low densities and high temperatures, it can be several tens and hundreds times smaller than the isentropic one. Therefore in the modified scheme, with big Courant number, the time stem can increase significantly.

*Key words:* gas dynamics with thermal conductivity, difference schemes, splitting in terms of physical processes, difference scheme stability, isentropic speed of sound, isothermal speed of sound, thermal sound dispersion.

SPECIFICS OF THE SIMPLE ALGORITHM APPLICATION FOR THE CALCULATION OF INCOMPRESSIBLE FLOWS / N. V. Tarasova, A. S. Kozelkov, D. P. Meleshkina, A. V. Lashkin, O. V. Denisova, M. A. Sizova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 3. P. 20—34.

This paper focuses on the description of the SIMPLE algorithm modification for the case of uncompressible flows and the applicability of the implemented algorithm for the calculation of transonic compressible flows within the LOGOS program package. The problems about flow over an airfoil and inside a diffuser are used to demonstrate the capabilities of the implemented algorithm in terms of reaching acceptable accuracy and convergence velocity when various schemes of convective component discretization are used and other computational parameters are changed. The obtained results are compared with the data of well known experimental tests.

*Key words:* SIMPLE algorithm, incompressible transonic flows, schemes of convective component discretization, LOGOS program package.

SEAMING POLYGONAL UNSTRUCTURED GRIDS IN THE "TIM-3D" TECHNIQUE / I. V. Sobolev, A. V. Shurygin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 3. P. 35—45.

The paper describes in detail the algorithm that realizes the method of seaming polygonal unstructured grids. This method is realized within the program for initial data calculation in the TIM-3D technique. The method applicability is shown on the examples of seaming various types of grids into a single computational grid of a domain. The performance of the algorithm that seams the 3D grids is studied.

*Key words:* TIM-3D technique, unstructured polygonal grids, seaming method, TIM-RND, LOGOS-Prepost.

ON A MODE OF IDEAL GAS PLANAR LAYER EXPANSION INTO VACUUM / V. E. Shemarulin, S. S. L'vova, Yu. V. Yanilkin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 3. P. 46–63.

We have discovered and investigated in detail the class of exact solutions of the gas dynamic equations that describe the isentropic ideal gas expansion into vacuum, when the gas fills a finite-thickness plane layer, in the case of specifically preset initial distributions of gas-dynamic parameters at the adiabatic index of 3.

As an example, the particular case with the zero gas initial velocity, while the initial density velocity, in accordance with quadratic law, turns into zero on the gas-vacuum interface. Characteristic features of the solution and its connection with the Legendre polynomial are highlighted. The obtained particular solution can be used for testing the techniques and programs for numerical solving the gas dynamics problems. The following specifics of a numerical method can be checked when this solution is used as a test: degree of the entropy preservation in isentropic flows, accuracy of the flows description in the vicinity of weak and strong discontinuities on the vacuum interfaces. Additional information on the numerical method accuracy can be obtained by the verification of main quality properties of exact solutions in numerical solution: immobility of sound points (weak discontinuity points), immobility of flow boundaries up to the known time, vacuum line movements (gradient catastrophe curves) under the known law.

The results of the numerical solution for the problem in question obtained with the EGAK technique are presented.

*Key words:* 1D gas dynamics equations, ideal gas, isentropic expansion into vacuum, exact solutions, numerical solution.

MODELING OF RADIATION DEFECT ACCUMULATION IN PURE MOLYBDENUM USING THE METHODS OF KINETIC THEORY AND CLUSTER DYNAMICS / M. Yu. Romashka, A. V. Yanilkin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 3. P. 64–75.

The modeling of radiation defect accumulation in thin pure molybdenum films under the effect of ion radiation was studied. Two approaches to the modeling were used: kinetic theory with mean cluster size and cluster dynamics.

The paper discusses the limitation of the first approach applicability. It can be inapplicable in the cases when defect clusters are generated in the cascades of atom shifts and the cluster diffusion to the drains, such as the surface, intergrain surfaces and dislocations, is present. This is due to the fact, that it is impossible to take into account the cluster distribution by size in the frames of the kinetic theory and to assign personal diffusion coefficients to each cluster size.

In the case of cluster dynamics the obtained results are in good agreement both with the experiment and the calculations by other authors. At that the proposed method of cluster dynamics realization differs from those used before: a stochastic approach to the cluster dynamics based on the SPPARKS code is implemented. The advantages of the stochastic approach are such as the algorithm simplicity, simplicity of reactions setting in SPPARKS, as well as high stability as compared to the standard approach, where the system of big amount of differential equations is solved. The main drawback of the approach is the limited reagent concentrations at the bottom.

*Key words:* kinetic theory, cluster dynamics, ion irradiation, thin films, molybdenum, point defects, SPPARKS.

MULTITORUS TOPOLOGY FOR HIGH PERFORMANCE AND FAULT-SAFE COMMUNICATION NETWORK WITH THE SMPO-10G ARCHITECTURE / V. G. Basalov, D. O. Kozlov, A. A. Kholostov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2015. No 3. P. 76—84.

The paper includes the *multitorus* topology for the communication network based on the system of interprocessor exchanges SMPO-10G. The paper describes the adaptive routing algorithms developed specially for this topology, which enable building the shortest and free-from-dead-ends message transmission routes, as well as providing high fault tolerance of the communication network and its balanced load.

*Key words:* multiprocessor computation complex, communication network, SMPO-10GA-1 hardware module, CMPIO-10GA-AD adapter unit, CMPIO-10GA-SW switch unit, adaptive routing algorithms, processor node, virtual channel.