

ISSN 2414-0171

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ И
ТЕХНИКИ

Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ

СЕРИЯ

**Математическое моделирование
физических процессов**

2019

ВЫПУСК 2

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 2

Издается с 1978 г.

Саров — 2019

Главный редактор
Шагалиев Р. М.

Заместители главного редактора:
Алексеев А. В., Тишкин В. Ф.

Ответственный секретарь:
Соколовская Е. В.

Члены редколлегии:

Бартенев Ю. Г., Бетелин В. Б., Бочков А. И., Вронский М. А.,
Дрёмов В. В., Залялов Н. Н., Иванов Н. В., Кибзун А. И.,
Козелков А. С., Козманов М. Ю., Куркин А. А., Петров И. Б.,
Прилуцкий М. Х., Смирнов Н. Н., Соколов С. С., Старостин Н. В.,
Степаненко С. А., Храмченков М. Г., Четверушкин Б. Н.,
Шестаков А. А., Янилкин Ю. В.

Адрес редакции и издателя: 607188,
г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37
тел. (83130)28406, *e-mail*: sokol@vniief.ru.
Адрес сайта журнала <http://vant.vniief.ru/>

УДК 519.6

КОНСЕРВАТИВНЫЙ ПЕРЕСЧЕТ ВЕЛИЧИН В РАЗНОСТНЫХ СХЕМАХ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ НА ЛАГРАНЖЕВО-ЭЙЛЕРОВОЙ СЕТКЕ

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

Представлен консервативный по полной энергии глобальный алгоритм пересчета величин на эйлеровом этапе счета шага по времени в разностных схемах газовой динамики на регулярной четырехугольной лагранжево-эйлеровой пространственной сетке. Значения газодинамических величин на новой сетке вычисляются из условия сохранения соответствующих интегральных величин. Вычисление новых значений удельной внутренней энергии производится на основе сохранения интегральной внутренней энергии с учетом поправок, обеспечивающих сохранение полной энергии. Если на лагранжевом этапе счета шага по времени используется полностью консервативная разностная схема, то консервативный пересчет величин обеспечивает полную консервативность схемы по совокупности обоих этапов, лагранжева и эйлерова. Приводятся результаты тестовых расчетов задачи о сильном точечном взрыве.

Ключевые слова: газовая динамика, лагранжево-эйлеровы сетки, пересчет величин, полностью консервативная схема, седовский взрыв.

Введение

Численные методы для моделирования газодинамических течений сплошной среды могут быть построены исходя из системы уравнений газовой динамики в переменных Лагранжа или в переменных Эйлера. Оба эти подхода имеют свои достоинства и недостатки.

Стремление соединить положительные стороны лагранжева и эйлерова подходов приводит к созданию разностных методов решения газодинамических задач на лагранжево-эйлеровой сетке. Такие разностные схемы основаны на интегродифференциальных уравнениях газовой динамики, записанных относительно элементарного объема, движущегося с произвольно заданной скоростью. Если заданная скорость элементарного объема в этих уравнениях равна скорости вещества, то имеем уравнения в форме Лагранжа; если же она равна нулю, то получаем уравнения в переменных Эйлера. Интегродифференциальные уравнения газовой динамики в лагранжево-эйлеровых координатах приводятся, например, в работах [1, 2].

Расчет одного шага по времени в лагранжево-эйлеровых методиках, как правило, подразделяется на два этапа.

На первом, лагранжевом, этапе счета шага вычисляются ускорения, возникающие под действием сил, обусловленных гидродинамическим давлением, и прочих сил, а затем — скорости в узлах пространственной сетки. Узлы сетки смещаются в соответствии с вычисленными скоростями. Затем вычисляются новые значения скалярных термодинамических величин в ячейках сетки.

На втором, эйлеровом, этапе производится построение новой пространственной сетки и пересчет величин на эту сетку. Изменение газодинамических величин на этом этапе вызвано конвективными потоками, возникающими вследствие смещения узлов сетки после лагранжева этапа счета шага.

Именно в аппроксимации конвективных потоков на эйлеровом этапе состоит основная трудность при создании лагранжево-эйлеровых методик численного решения задач газовой динамики. Она

заключается в том, что повышение порядка аппроксимации уравнений конвекции входит в противоречие с получением монотонных численных решений. Согласно теореме С. К. Годунова [3] в линейном случае монотонность на разрывных решениях можно обеспечить только в разностных схемах первого порядка аппроксимации. В поисках выхода из этого противоречия и обхода условий теоремы С. К. Годунова разрабатываются так называемые схемы переменного порядка аппроксимации производных по пространству. В таких схемах используются нелинейные механизмы переключения от аппроксимации второго порядка и выше на гладких решениях к аппроксимации первого порядка на разрывных решениях. Для получения монотонных решений используются различные ограничители потоков величин, зависящие от локальных свойств численных решений. Множество ссылок на численные методы подобного типа можно найти в обзоре литературы из [4].

В данной работе представлен алгоритм пересчета величин на эйлеровом этапе методики ВКЛ (Выделенные Контактные Линии) [5, 6], предназначенной для расчета двумерных газодинамических течений, обладающих плоской или осевой симметрией, на регулярных четырехугольных сетках с выделением подвижных контактных границ между веществами ломаными линиями, не совпадающими с линиями сетки.

Пересчет величин производится по алгоритму глобального типа путем поиска пересечений ячеек старой пространственной сетки, полученной после лагранжева этапа счета шага по времени, с ячейками новой сетки эйлерова этапа. Здесь не будут рассматриваться *смешанные* ячейки сетки, через которые проходят выделенные контактные линии, поскольку для изложения сути алгоритма это не существенно.

Заметим, что алгоритм пересчета методики ВКЛ можно рассматривать как разностную схему с аппроксимацией конвективных потоков. Эта схема формально будет иметь первый порядок аппроксимации по пространственным переменным.

В силу глобального характера алгоритма в методике ВКЛ нет ограничения, неизбежного для алгоритмов пересчета локального типа, где условия устойчивости счета требуют, чтобы новая сетка была получена смещением узлов старой сетки и при этом относительное смещение узлов не превышало бы определенного значения (чаще всего это $1/3$). В качестве новой сетки может быть использована любая регулярная четырехугольная сетка, приемлемая для проведения расчета. По своей структуре, расположению узлов она может быть никак не связана со старой сеткой. В частности, количество строк и количество столбцов старой и новой сеток могут не совпадать. Кроме того, программы построения сетки и пересчета величин могут подключаться не на каждом шаге по времени, а через заданное число шагов или автоматически по некоторым критериям. В качестве такого критерия можно использовать, например, потерю выпуклости ячеек пространственной сетки на лагранжевом этапе счета шага по времени.

При вычислении значений газодинамических величин на новой сетке будем исходить из выполнения законов сохранения некоторых интегральных величин. А именно, значения плотности на новой сетке вычисляются из условия сохранения массы, значения скорости в узлах новой сетки — из условия сохранения количества движения.

Для вычисления значений удельной внутренней энергии в ячейках новой сетки суммируются вклады интегральной внутренней энергии из ячеек старой сетки. Для сохранения полной энергии неотрицательная разница между кинетической энергией, полученной суммированием кинетических энергий на старой сетке, и кинетической энергией, полученной по значениям новых скоростей, добавляется к интегральной внутренней энергии ячеек новой сетки.

Вычисление новых значений плотности, скорости, искусственной вязкости

В статье приняты следующие обозначения.

Запись $\vec{Z} = (x, y)$ обозначает точку в плоскости XOY . В случае плоской симметрии течений OX — ось абсцисс, OY — ось ординат декартовой прямоугольной системы координат. Для осесимметричных течений OX — ось вращения, OY — ось радиусов.

Узлы пространственной сетки $\vec{Z}_{i,k} = (x_{i,k}, y_{i,k})$ (рис. 1), являющиеся вершинами четырехугольных ячеек, обозначаются двойными целочисленными индексами $i = 1, 2, \dots, N_i$, $k = 1, 2, \dots, N_k$. Векторы скорости $\vec{U}_{i,k} = (u_{i,k}, v_{i,k})$ определяются в узлах сетки.

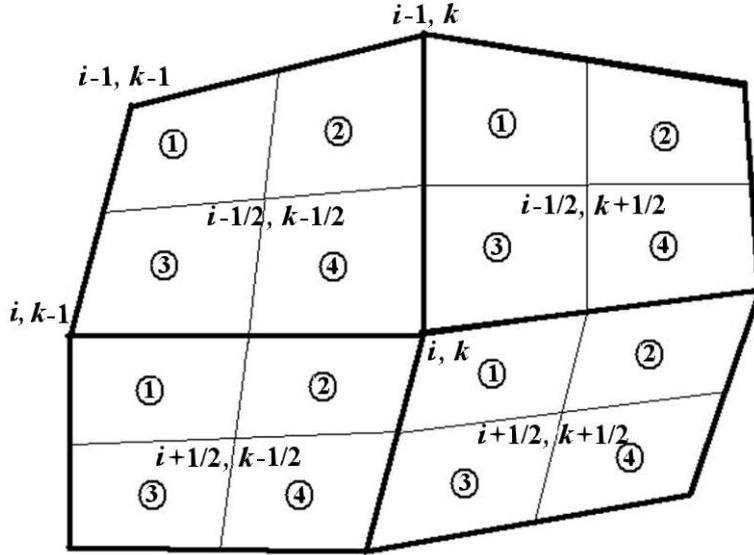


Рис. 1. Локальная нумерация вложенных четырехугольников

Ячейкам сетки придаются нижние полуцелые индексы: $\Omega_{i-1/2, k-1/2}$. Скалярные термодинамические величины — плотность $\rho_{i-1/2, k-1/2}$, удельная внутренняя энергия $E_{i-1/2, k-1/2}$, давление $P_{i-1/2, k-1/2}$, искусственная вязкость $Q_{i-1/2, k-1/2}$ — определяются в ячейках с теми же индексами.

Как на лагранжевом, так и на эйлеровом этапе методики ВКЛ каждая ячейка сетки $\Omega_{i-1/2, k-1/2}$ разбивается своими средними линиями на четырехугольники $\square^j_{i-1/2, k-1/2}$, $j = 1, 2, 3, 4$, вложенные в ячейку. Одной из вершин каждого вложенного четырехугольника является вершина самой ячейки сетки. Локальная нумерация этих четырехугольников показана на рис. 1. Кроме значения плотности $\rho_{i-1/2, k-1/2}$, в самой ячейке сетки дополнительно вводятся значения плотности $\rho^1_{i-1/2, k-1/2}$, $\rho^2_{i-1/2, k-1/2}$, $\rho^3_{i-1/2, k-1/2}$, $\rho^4_{i-1/2, k-1/2}$ в каждом из вложенных четырехугольников $\square^j_{i-1/2, k-1/2}$, $j = 1, 2, 3, 4$.

На лагранжевом этапе счета шага значения плотности $\rho^j_{i-1/2, k-1/2}$, $j = 1, 2, 3, 4$, вычисляются из условия сохранения массы в каждом из вложенных четырехугольников. В процессе пересчета величин новые значения плотности также вычисляются в каждом из вложенных четырехугольников. Как на лагранжевом этапе, так и по завершении эйлерова этапа счета шага массы ячеек сетки складываются из масс четырехугольников, на которые разбита данная ячейка:

$$M_{i-1/2, k-1/2} = M1_{i-1/2, k-1/2} + M2_{i-1/2, k-1/2} + M3_{i-1/2, k-1/2} + M4_{i-1/2, k-1/2}. \quad (1)$$

Масса узла сетки $M_{i, k}$ определяется как сумма масс вложенных четырехугольников, для которых данный узел является общей вершиной (см. рис. 1):

$$M_{i, k} = M1_{i+1/2, k+1/2} + M2_{i-1/2, k+1/2} + M3_{i-1/2, k-1/2} + M4_{i+1/2, k-1/2}. \quad (2)$$

То есть масса узла представляет собой массу, заключенную в восьмиугольнике $\Omega_{i, k}$, образованном объединением вложенных четырехугольников:

$$\Omega_{i, k} = \square^1_{i+1/2, k+1/2} \cup \square^2_{i-1/2, k+1/2} \cup \square^3_{i-1/2, k-1/2} \cup \square^4_{i+1/2, k-1/2}.$$

Объем многоугольника $\Omega_{i, k}$ есть объем интегрирования импульса, а его граница — контур интегрирования уравнения движения.

Согласованное определение массы узла по формуле (2) на лагранжевом этапе и на этапе глобального пересчета величин играет ту же роль, что и сбалансированная аппроксимация конвективных потоков в лагранжево-эйлеровых разностных схемах [7, 8]. А именно, она позволяет согласованно определить импульс узла сетки и, следовательно, обеспечить выполнение закона сохранения импульса по совокупности обоих этапов счета шага по времени.

Поскольку пересчет величин носит глобальный характер, то допускается, чтобы число строк и столбцов пространственной сетки лагранжева и эйлера этапа не совпадали. Поэтому для элементов лагранжевой сетки и величин, определенных на ней, будем использовать нижние индексы i, k : $\vec{Z}_{i,k} = (x_{i,k}, y_{i,k})$, $\Omega_{i-1/2,k-1/2}$, $\Omega_{i,k}$, а для элементов и величин на новой сетке — индексы in, kn : $\vec{Z}_{in,kn} = (x_{in,kn}, y_{in,kn})$, $\Omega_{in-1/2,kn-1/2}$, $\Omega_{in,kn}$. Иногда для сокращения записи вместо двойного индекса $(in - 1/2, kn - 1/2)$ будем использовать номер ячейки $Яn$: $\Omega_{in-1/2,kn-1/2} \equiv \Omega_{Яn}$.

Обозначения окончательных значений величин после пересчета снабжаются верхним индексом $n + 1$: f^{n+1} ; обозначения газодинамических величин, полученных после лагранжева этапа, не содержат верхних индексов.

Пересчет газодинамических величин на новую сетку производится по вкладам соответствующих интегральных величин со старой сетки. Для вычисления интегральных вкладов ищутся многоугольники пересечения вложенных четырехугольников старой и новой сеток. Поскольку новые значения плотности вычисляются не только в ячейках, но и отдельно в каждом вложенном четырехугольнике новой сетки $\square jn_{in-1/2,kn-1/2}$, $jn = 1, 2, 3, 4$, $in = 2, \dots, N_{in}$, $kn = 2, \dots, N_{kn}$, то именно вложенные четырехугольники на старой и новой сетках являются основными геометрическими объектами, для которых ищутся многоугольники пересечения.

В процессе поиска пересечений вложенных четырехугольников старой и новой сеток в программе пересчета величин методики ВКЛ четырехугольники старой сетки $\square j_{i-1/2,k-1/2}$, $j = 1, 2, 3, 4$, $i = 2, \dots, N_i$, $k = 2, \dots, N_k$, перебираются в циклах по индексам i, k и по номерам j четырехугольников. Чтобы не искать пустых пересечений, разработан и реализован экономичный алгоритм построения контура пересечения двух многоугольников и поиска пересекающихся вложенных четырехугольников старой и новой сеток, который позволяет, во-первых, не сделать ни одной попытки поиска пустых пересечений и, во-вторых, обнаружить и реализовать все, без исключения, реально существующие пересечения.

После того, как для очередного вложенного четырехугольника старой сетки найден многоугольник пересечения с вложенным четырехугольником новой сетки $\omega_p = \square j_{i-1/2,k-1/2} \cap \square jn_{in-1/2,kn-1/2}$, вычисляется масса этого многоугольника

$$M_p = \rho_p V_p, \quad (3)$$

где V_p — площадь или объем вращения многоугольника ω_p в зависимости от типа симметрии течения. Значение плотности ρ_p берется из пересекающегося вложенного четырехугольника $\square j_{i-1/2,k-1/2}$ старой сетки.

Для четырехугольников новой сетки полученные вклады массы (3) суммируются:

$$M jn_{in-1/2,kn-1/2} = \sum_{p=1}^{N_p(jn, Яn)} M_p, \quad (4)$$

где $N_p(jn, Яn)$ — количество пересечений, полученных для вложенного четырехугольника $\square jn_{in-1/2,kn-1/2}$ в ячейке новой сетки. В соответствии с (1) массы пересечений (3) суммируются и для ячеек новой сетки:

$$M_{in-1/2,kn-1/2} = \sum_{p=1}^{N_p(Яn)} M_p, \quad (5)$$

где $N_p(Яn)$ — количество пересечений, полученных для данной новой ячейки сетки $\Omega_{in-1/2,kn-1/2}$.

В соответствии с определением (2) массы, относящиеся к узлам новой сетки, также складываются из масс пересечений (3):

$$M_{in,kn} = \sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} M_p, \quad (6)$$

где $N_p(in, kn)$ — количество пересечений, полученных для восьмиугольника $\Omega_{in,kn}$, ограниченного контуром интегрирования импульса в узле новой сетки $\vec{Z}_{in,kn}$.

После завершения суммирования всех вкладов массы для четырехугольников $\square j_{in-1/2, kn-1/2}$ (4) и ячеек (5) вычисляются новые значения плотности

$$\rho j_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1} = \frac{M j_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}}{V j_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}}; \quad \rho_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1} = \frac{M_{in-1/2, kn-1/2}}{V_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}}. \quad (7)$$

Нет необходимости вычислять значения плотности в восьмиугольниках $\Omega_{in, kn}$, поскольку для вычисления вектора скорости нужны только их массы (6).

Новые значения искусственной вязкости $Q_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}$, определенные в ячейках сетки, вычисляются по аналогии со значениями плотности (7) путем интегрирования по объемам пересечения.

Для последующего вычисления новых значений составляющих вектора скорости в узле $\vec{Z}_{in, kn}$ новой сетки параллельно с суммированием вкладов массы (6) суммируются вклады компонент количества движения:

$$I x_{in, kn} = \sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p u_p; \quad I y_{in, kn} = \sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p v_p. \quad (8)$$

Здесь M_p обозначают те же самые массы пересечения (3), которые суммируются для массы узла $M_{in, kn}$ новой сетки (6), и суммирование производится по тем же пересечениям. Выбор узла старой сетки, из которого берутся значения составляющих вектора скорости u_p, v_p в формулах (8), зависит от номера j пересекающегося четырехугольника $\square j_{i-1/2, k-1/2}$ старой сетки. Значения u_p, v_p берутся из того узла старой сетки $\vec{Z}_{i, k}$, который является одной из вершин вложенного четырехугольника $\square j_{i-1/2, k-1/2}$ (см. рис. 1).

По накопленным вкладам компонент количества движения (8) вычисляются новые значения составляющих вектора скорости в узле новой сетки:

$$u_{in, kn}^{n+1} = \frac{I x_{in, kn}}{M_{in, kn}}; \quad v_{in, kn}^{n+1} = \frac{I y_{in, kn}}{M_{in, kn}}, \quad (9)$$

где $M_{in, kn}$ — масса узла (6).

При таком способе пересчета скоростей с учетом определения массы узла (2), во-первых, выполняется закон сохранения импульса по совокупности лагранжева и эйлерова этапов счета шага по времени и, во-вторых, обеспечивается монотонность значений компонент скоростей на этапе пересчета величин.

Вычисление новых значений удельной внутренней энергии

Вычисление новых значений удельной внутренней энергии на этапе пересчета величин в методике ВКЛ производится на основе сохранения интегральной внутренней энергии с учетом поправок, обеспечивающих сохранение полной энергии.

Значения удельной внутренней энергии определены в ячейках сетки. В соответствии с этим для ячейки $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$ новой сетки вклады интегральной внутренней энергии суммируются:

$$\tilde{J}_{in-1/2, kn-1/2} = \sum_{p=1}^{N_p(\text{Ян})} M_p E_p. \quad (10)$$

Здесь M_p — те же самые массы пересечения (3), что и в формулах (4)–(6), (8). Значения удельной внутренней энергии E_p в объеме пересечения V_p (3) при суммировании (10) берутся из ячейки $\Omega_{i-1/2, k-1/2}$ старой сетки, в которой расположен пересекающийся вложенный четырехугольник $\square j_{i-1/2, k-1/2} \in \Omega_{i-1/2, k-1/2}$.

Зачастую после вычисления интегральных внутренних энергий (10) новые значения удельной внутренней энергии на новой сетке вычисляют по формулам

$$\tilde{E}_{in-1/2, kn-1/2} = \frac{\tilde{J}_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in-1/2, kn-1/2}}, \quad (11)$$

где $M_{in-1/2, kn-1/2}$ — суммированная масса ячейки (5). Ясно, что при этом полная энергия счетной области, вычисленная по значениям величин на новой сетке, не совпадет с полной энергией счетной области, вычисленной по значениям величин на старой сетке. Разница в значениях полной энергии на старой и новой сетках будет целиком определяться разницей в интегральной кинетической энергии области. При таком пересчете разностная схема по совокупности лагранжева и эйлера этапов счета шага по времени является неконсервативной.

Между тем известно [9], что консервативность схемы является необходимым условием сходимости численных расчетов в классе разрывных решений. Более того, в расчетах по неконсервативным схемам при увеличении числа точек сетки возможна сходимость к численному решению, которое не является решением системы уравнений газовой динамики, т. е. к неправильному решению. Примеры таких расчетов на сходимость с неконсервативным пересчетом энергии на эйлеровом этапе из условия сохранения интегральной внутренней энергии приводятся в работе [10].

В методике ВКЛ был предложен и реализован следующий алгоритм балансного пересчета значений удельной внутренней энергии.

В процессе пересчета величин параллельно с накоплением массы узла $M_{in, kn}$ (6) и составляющих количества движения $Ix_{in, kn}$, $Iy_{in, kn}$ (8) в узле новой сетки $\vec{Z}_{in, kn}$ вычисляется величина $K_{in, kn}^{(\Sigma)}$, которая является суммой вкладов кинетической энергии, вычисленной по тем же значениям составляющих вектора скорости u_p , v_p , что и в формулах (8):

$$K_{in, kn}^{(\Sigma)} = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p (u_p^2 + v_p^2). \quad (12)$$

Здесь также используются те же массы пересечения (3).

С другой стороны, новые значения вектора скорости $\vec{U}_{in, kn}^{n+1} = (u_{in, kn}^{n+1}, v_{in, kn}^{n+1})$, вычисленные в узлах новой сетки $\vec{Z}_{in, kn}$ по формулам (9), определяют новые значения $K_{in, kn}$ кинетической энергии в этих узлах:

$$K_{in, kn} = \frac{1}{2} M_{in, kn} \left[\left(u_{in, kn}^{n+1} \right)^2 + \left(v_{in, kn}^{n+1} \right)^2 \right]. \quad (13)$$

Дефицит кинетической энергии в узле новой сетки $\vec{Z}_{in, kn}$ обозначим символом $\Delta K_{in, kn}$:

$$\Delta K_{in, kn} = K_{in, kn}^{(\Sigma)} - K_{in, kn}. \quad (14)$$

Для сохранения баланса полной энергии на этапе пересчета величин дефицит кинетической энергии добавляется к интегральной внутренней энергии. При этом значение $\Delta K_{in, kn}$, определенное в узле новой сетки $\vec{Z}_{in, kn}$, распределяется между ячейками сетки пропорционально массам вложенных четырехугольников, для которых узел $\vec{Z}_{in, kn}$ является общей вершиной.

Таким образом, модифицированная интегральная внутренняя энергия $J_{in-1/2, kn-1/2}$ ячейки новой сетки $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$ после добавления дефицита кинетической энергии будет равна

$$J_{in-1/2, kn-1/2} = \tilde{J}_{in-1/2, kn-1/2} + \frac{M1_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in-1, kn-1}} \Delta K_{in-1, kn-1} + \frac{M2_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in, kn-1}} \Delta K_{in, kn-1} + \frac{M3_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in, kn}} \Delta K_{in, kn} + \frac{M4_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in-1, kn}} \Delta K_{in-1, kn}. \quad (15)$$

Здесь $\tilde{J}_{in-1/2, kn-1/2}$ — интегральная внутренняя энергия (10) ячейки новой сетки, полученная суммированием интегральных вкладов удельной внутренней энергии; $M^j_{in-1/2, kn-1/2}$, $j = 1, 2, 3, 4$ — массы вложенных четырехугольников (см. рис. 1) в ячейке $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$; $M_{in, kn}$, $M_{in-1, kn}$, $M_{in-1, kn-1}$, $M_{in, kn-1}$ — массы узлов новой сетки, являющихся вершинами ячейки $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$.

После этого новые значения удельной внутренней энергии $E_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}$ в ячейках новой сетки вычисляются по формулам

$$E_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1} = \frac{J_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in-1/2, kn-1/2}}. \quad (16)$$

Ясно, что при таком способе вычисления значений удельной внутренней энергии по формулам (10), (15), (16) закон сохранения полной энергии в счетной области на этапе пересчета величин будет выполнен.

Если при этом на лагранжевом этапе счета шага по времени используется разностная схема, сохраняющая полную энергию счетной области, то закон сохранения полной энергии будет выполнен и по совокупности обоих этапов — лагранжева и пересчета величин.

Докажем теперь два важных утверждения, касающихся дефицита $\Delta K_{in, kn}$ (14) в узлах новой сетки.

Утверждение 1. Дефицит кинетической энергии $\Delta K_{in, kn}$ (14) в узлах новой сетки неотрицателен.

Доказательство. Кинетическая энергия (13), вычисленная в узле новой сетки $\vec{Z}_{in, kn}$ по новым значениям скорости, имеет вид

$$K_{in, kn} = \frac{1}{2M_{in, kn}} \left[\left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p u_p \right)^2 + \left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p v_p \right)^2 \right].$$

С учетом (12) и выражения (6) для массы узла новой сетки можно записать $\Delta K_{in, kn}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta K_{in, kn} = \frac{1}{2M_{in, kn}} & \left[\left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p \right) \left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p u_p^2 \right) - \left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p u_p \right)^2 + \right. \\ & \left. + \left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p \right) \left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p v_p^2 \right) - \left(\sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} M_p v_p \right)^2 \right]. \quad (17) \end{aligned}$$

В силу неравенства Коши—Буняковского из (17) следует $\Delta K_{in, kn} \geq 0$, что и требовалось доказать.

Таким образом, ни модифицированные интегральные внутренние энергии $J_{in-1/2, kn-1/2}$ (15), ни вычисленные по ним в процессе пересчета удельные внутренние энергии $E_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}$ (16) не могут приобрести отрицательных значений.

Утверждение 2. Удельные внутренние энергии $\tilde{E}_{in-1/2, kn-1/2}$ (11), вычисленные по интегральным вкладам внутренней энергии, при достаточно гладком поле скоростей отличаются от удельных внутренних энергий $E_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}$ (16), вычисленных по интегральным энергиям с учетом поправок (15), на величину второго порядка малости по линейному размеру ячейки новой сетки. То есть

$$\Delta E_{in-1/2, kn-1/2} = E_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1} - \tilde{E}_{in-1/2, kn-1/2} = O(h^2), \quad (18)$$

где h — некоторый средний линейный пространственный размер ячейки сетки.

Доказательство. Преобразуем выражение (17) для $\Delta K_{in, kn}$.

Можно показать, что имеют место равенства

$$\left(\sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} M_p \right) \left(\sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} M_p u_p^2 \right) - \left(\sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} M_p u_p \right)^2 = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} \left[\sum_{q=1}^{N_p(in,kn)} M_p M_q (u_p - u_q)^2 \right] \right\};$$

$$\left(\sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} M_p \right) \left(\sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} M_p v_p^2 \right) - \left(\sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} M_p v_p \right)^2 = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} \left[\sum_{q=1}^{N_p(in,kn)} M_p M_q (v_p - v_q)^2 \right] \right\}.$$

Следовательно,

$$\Delta K_{in,kn} = \frac{1}{4M_{in,kn}} \sum_{p=1}^{N_p(in,kn)} \left\{ \sum_{q=1}^{N_p(in,kn)} M_p M_q \left[(u_p - u_q)^2 + (v_p - v_q)^2 \right] \right\}. \quad (19)$$

Из формулы (15) с учетом выражения (19) для дефицита кинетической энергии в узлах сетки и формул для удельных значений энергии (11), (16) в ячейках новой сетки $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$ получаем

$$\begin{aligned} E_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1} - \tilde{E}_{in-1/2, kn-1/2} &= \\ &= \frac{1}{4M_{in-1/2, kn-1/2}} \left\{ \frac{M1_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in-1, kn-1}^2} \sum_{p=1}^{N_p(in-1, kn-1)} \left\{ \sum_{q=1}^{N_p(in-1, kn-1)} M_p M_q \left[(u_p - u_q)^2 + (v_p - v_q)^2 \right] \right\} + \right. \\ &+ \frac{M2_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in, kn-1}^2} \sum_{p=1}^{N_p(in, kn-1)} \left\{ \sum_{q=1}^{N_p(in, kn-1)} M_p M_q \left[(u_p - u_q)^2 + (v_p - v_q)^2 \right] \right\} + \\ &+ \frac{M3_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in, kn}^2} \sum_{p=1}^{N_p(in, kn)} \left\{ \sum_{q=1}^{N_p(in, kn)} M_p M_q \left[(u_p - u_q)^2 + (v_p - v_q)^2 \right] \right\} + \\ &\left. + \frac{M4_{in-1/2, kn-1/2}}{M_{in-1, kn}^2} \sum_{p=1}^{N_p(in-1, kn)} \left\{ \sum_{q=1}^{N_p(in-1, kn)} M_p M_q \left[(u_p - u_q)^2 + (v_p - v_q)^2 \right] \right\} \right\}. \quad (20) \end{aligned}$$

Все пары векторов скорости $\vec{U}_p = (u_p, v_p)$, $\vec{U}_q = (u_q, v_q)$ в формуле (20) определены в точках старой сетки, которые принадлежат области, имеющей непустые пересечения с объединением областей интегрирования уравнения движения (см. рис. 1) в четырех вершинах ячейки $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$ новой сетки. То есть эти пары точек удалены друг от друга на расстояние, не большее, чем $O(h)$, где h — некоторый средний линейный пространственный размер ячейки новой сетки. Поэтому на гладких течениях правая часть соотношения (20) является величиной порядка $O(h^2)$, что и доказывает утверждение (18).

Из формулы (20) также ясно, что если все скорости в узлах старой сетки, по которым вычисляются скорости в узлах новой сетки, являющихся вершинами ячейки $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$, равны между собой, то $\Delta E_{in-1/2, kn-1/2} = 0$. То есть тогда новые значения $E_{in-1/2, kn-1/2}^{n+1}$ удельной внутренней энергии в ячейке $\Omega_{in-1/2, kn-1/2}$ определяются исключительно значениями удельной внутренней энергии на старой сетке.

Тестовые расчеты задачи о сильном точечном взрыве

Аналитическое решение задачи о сильном точечном взрыве было получено и опубликовано Л. И. Седовым в 1946 году. Постановка и решение этой задачи излагаются, например, в книгах [11, 12].

Рассматривается задача о распространении сферической ударной волны, возникающей в результате сильного взрыва, т. е. мгновенного выделения в начальный момент времени $t = 0$ большого

количества энергии $J^{(0)}$ в некоторой шаровой области с небольшим радиусом $R_E(0)$. Предполагается, что ударная волна расположена достаточно далеко от центра взрыва, чтобы источник энергии можно было считать точечным, и в то же время достаточно близко к источнику, где ударная волна еще обладает большой интенсивностью.

Здесь рассматривается шаровая область $0 \leq R \leq R_\Gamma$, заполненная газом с начальной плотностью $\rho^0 = 1$ и уравнением состояния идеального газа $P = (\gamma - 1)\rho E$ со значением $\gamma = 1,4$. Начальный радиус области энерговыделения $R_E(0) = 0,01$. Полная энергия, выделенная в массе газа, расположенного в области $0 < R < 0,01$, полагалась равной $J^{(0)} = 0,850155546$.

Согласно аналитическому решению при таком значении полной энергии радиус фронта ударной волны на момент времени $t = 1$ равен $R_{УВ} = 1$, и при этом скорость ударной волны $D_{УВ} = 0,4$. Непосредственно за фронтом ударной волны на этот момент времени имеют место следующие значения параметров: радиальная скорость газа $U^{(1)} = 1/3$; плотность $\rho^{(1)} = 6$; давление $P^{(1)} = 4/30$. Значение $\rho^{(1)}$ не зависит от времени.

Внешний радиус области рассматриваемого течения полагался равным $R_\Gamma = 1,1$. Заданное значение полной энергии определяет начальное значение удельной внутренней энергии единицы массы в области $0 < R < 0,01$: $E^0 = 202\,959,686314$.

Все расчеты данной задачи проводились в двумерной постановке на радиальной сетке с шагом сетки по углу, равным $h_\theta = 2,5^\circ$. Начальный шаг сетки по радиусу h_R^0 варьировался. Были проведены серии расчетов на сгущающихся сетках со значениями $h_R^0 = 0,01; 0,005; 0,0025$. При каждом сгущении сетки по радиусу сгущались только счетные интервалы в области $0,01 < R < 1,1$. На область начального мгновенного энерговыделения $0 < R < 0,01$ во всех расчетах брался один счетный интервал по радиусу. При этом в расчетах с пересчетом величин перестроение сетки также производилось только в области без энерговыделения. Граница области энерговыделения во всех расчетах оставалась *лагранжевой*, т. е. перемещалась вместе с веществом вдоль лагранжевой траектории.

Начальный шаг по времени во всех расчетах брался равным $\tau = 10^{-7}$. В процессе счета, как обычно, шаг по времени выбирался из условия Куранта в совокупности с условием на ударной волне.

На рис. 2 показаны в сравнении с аналитическим решением профили величин, полученные на момент времени $t = 1$ по разностной схеме расчета *лагранжевой газовой динамики* методики ЛЭГАК [8]. Расчет был проведен на самой подробной из рассматриваемых сеток, когда начальный шаг сетки по радиусу $h_R^0 = 0,0025$.

Из рис. 2 видно, что результаты *лагранжева* расчета хорошо согласуются с аналитическим решением. Это означает, в частности, что решение поставленной задачи к моменту времени $t = 1$ вышло на автоматический режим. То есть отношение начального радиуса энерговыделяющей области к текущему радиусу фронта ударной волны, равное в данном случае $R_E(0)/R_{УВ} = 0,01$, вполне достаточно для того, чтобы считать источник энергии точечным.

Расчеты, результаты которых показаны на рис. 3 (см. также цветную вкладку), проводились по методике ЛЭГАК-ВКЛ с подключением программы перестроения сетки и пересчета величин на каждом шаге по времени. При каждом перестроении сетка в радиальном направлении строилась равномерным разбиением по радиусу интервала $R_E(t) < R < 1,1$, где $R_E(t)$ — текущий радиус границы области энерговыделения. Сама граница области энерговыделения перемещалась вместе с веществом. Пересчет величин производился по представленному в данной работе консервативному алгоритму методики ВКЛ.

На рис. 3 (см. также цветную вкладку) представлены профили скорости, плотности и давления, полученные в трех расчетах, проведенных с числом счетных интервалов в области $0,01 < R < 1,1$ невозмущенного в начальный момент времени газа, равным 109 ($h_R^0 = 0,01$), 218 ($h_R^0 = 0,005$) и 436 ($h_R^0 = 0,0025$). Видно, что с увеличением числа точек сетки численное решение сходится к аналитическому. Профили величин, полученные на самой подробной из рассмотренных сеток, на взгляд автора, удовлетворительно согласуются с точным решением. Положение фронта ударной волны с учетом "размазывания" разрыва во всех трех расчетах также находится в удовлетворительном согласии с точным решением.

Расчеты, результаты которых приведены на рис. 4 (см. также цветную вкладку), отличаются от расчетов, представленных на рис. 3, только тем, что они выполнены в режиме с пересчетом величин

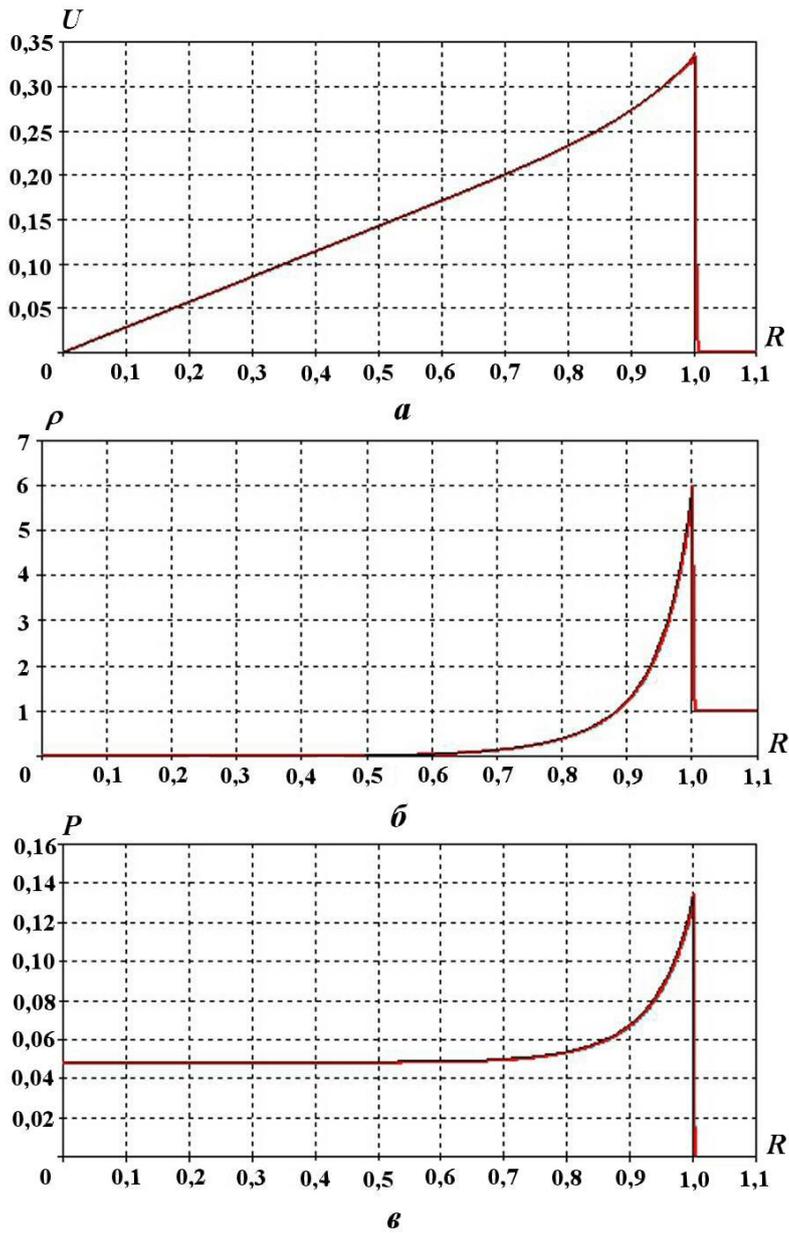


Рис. 2. Профили скорости (a), плотности (b) и давления (ϵ), $t = 1$: — — лагранжев расчет; — — аналитическое решение

через каждые 10 шагов по времени, а не на каждом шаге. Из сравнения рисунков видно, что эти результаты мало отличаются друг от друга.

Заключение

Представлен разработанный и реализованный в методике ВКЛ алгоритм глобального пересчета величин. Глобальный характер алгоритма, во-первых, не ограничивает смещения узлов сетки при ее перестроениях и, во-вторых, позволяет подключать программу пересчета величин не на каждом шаге по времени, а через заданное число шагов или автоматически по некоторым критериям. Это можно использовать для экономии затрат времени на расчет.

Для сохранения баланса полной энергии на этапе пересчета величин дефицит кинетической энергии на новой сетке добавляется к интегральной внутренней энергии.

В работе доказаны следующие утверждения:

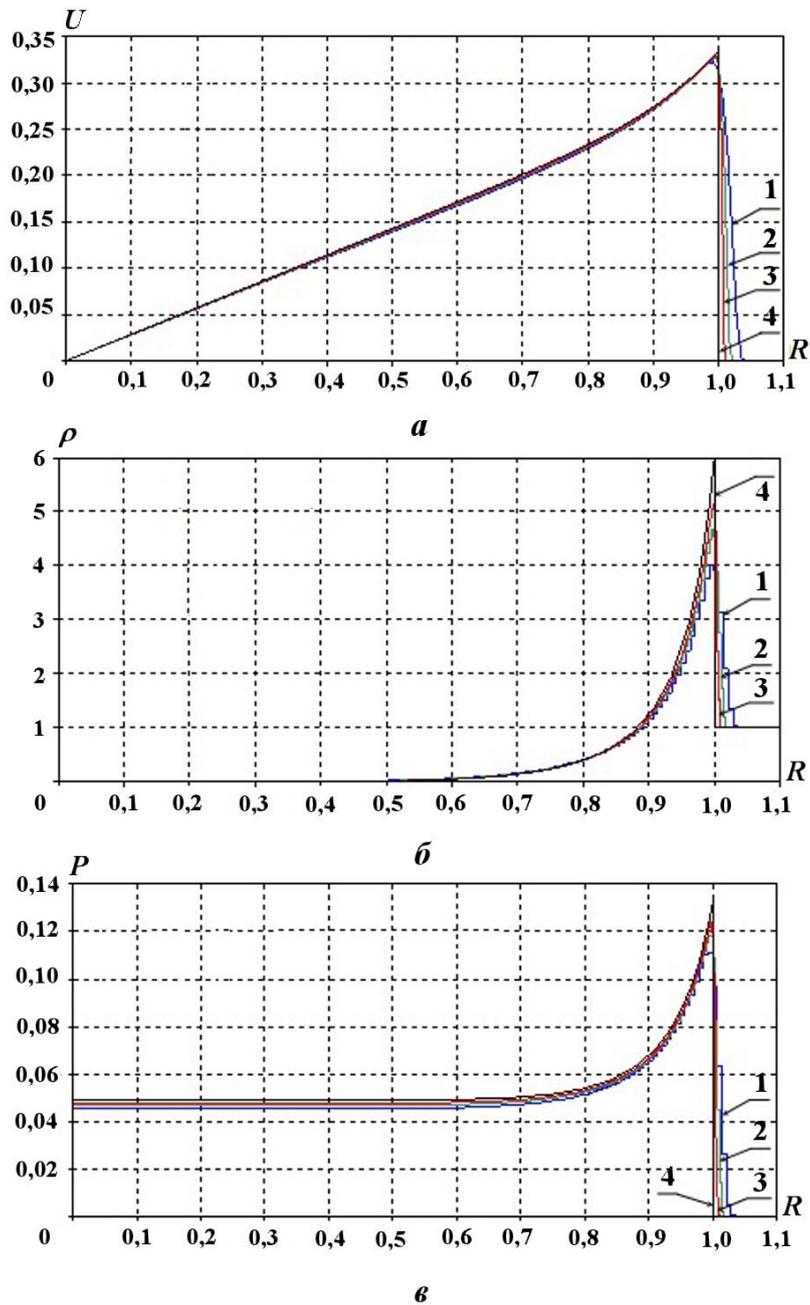


Рис. 3. Профили скорости (*a*), плотности (*б*) и давления (*в*) в расчетах ЛЭГАК-ВКЛ на сходимость с пересчетом величин на каждом шаге по времени, $t = 1$: 1 — $h_R^0 = 0,01$; 2 — $h_R^0 = 0,005$; 3 — $h_R^0 = 0,0025$; 4 — аналитическое решение

1. Добавки к интегральной внутренней энергии каждой ячейки сетки неотрицательны.
2. Удельные внутренние энергии, вычисленные по интегральным вкладам внутренней энергии, отличаются от удельных внутренних энергий, вычисленных по интегральным энергиям с учетом поправок, на величину второго порядка малости по некоторому линейному размеру ячейки новой сетки.
3. На постоянном по пространству поле скоростей добавки к интегральной внутренней энергии равны нулю.

Представленный алгоритм консервативного пересчета величин можно использовать в паре с любой консервативной по полной энергии разностной схемой лагранжева этапа счета шага по времени.

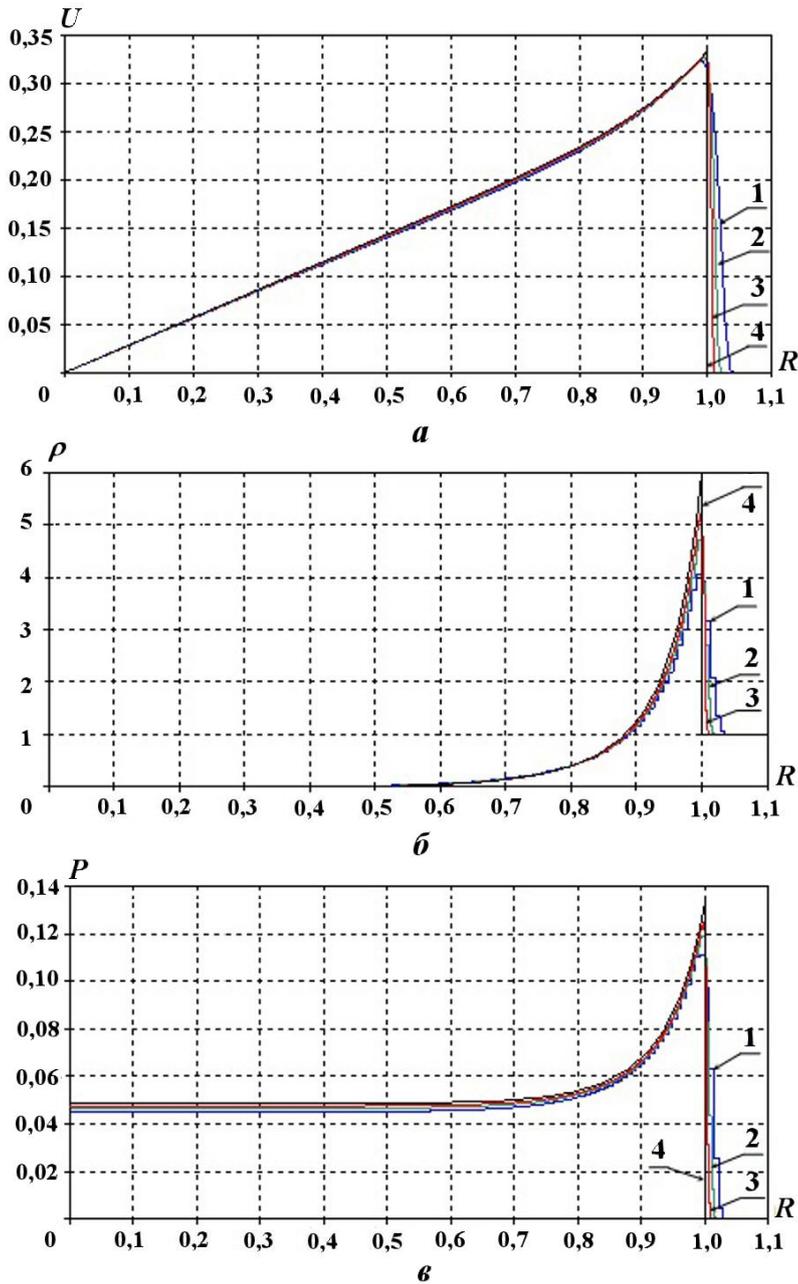


Рис. 4. Профили скорости (а), плотности (б) и давления (в) в расчетах ЛЭГАК-ВКЛ на сходимость с пересчетом величин через 10 шагов по времени, $t = 1$: 1 — $h_R^0 = 0,01$; 2 — $h_R^0 = 0,005$; 3 — $h_R^0 = 0,0025$; 4 — аналитическое решение

Таким образом, в совокупности получается полностью консервативная разностная схема газовой динамики на лагранжево-эйлеровой сетке.

При этом в разностной схеме лагранжева этапа можно не прибегать к разбиению ячеек на четырехугольники, а использовать стандартное определение массы узла сетки как четверти суммы масс ячеек, для которых данный узел является общей вершиной. Однако на этапе пересчета величин по-прежнему должны использоваться вложенные четырехугольники. Меняется только определение плотности в четырехугольниках, которые теперь должны вычисляться из условия того, что в них содержится четверть массы ячейки:

$$\rho j_{i-1/2,k-1/2} = \frac{1}{4} \frac{M_{i-1/2,k-1/2}}{V j_{i-1/2,k-1/2}}.$$

Отметим, что в численных расчетах по консервативной схеме нужно с известной осторожностью использовать различные операторы сглаживания поля скоростей. Зачастую эти операторы не сохраняют не только полную энергию, но и составляющие вектора количества движения.

Список литературы

1. Хёрт С. Произвольный лагранжево-эйлеров численный метод // Численные методы в механике жидкостей. М.: Мир, 1973. С. 156—164.
Khert S. Proizvolny lagranzhevo-eylerov chislenny method // Chislennye metody v mekhanike zhidkostey. M.: Mir, 1973. S. 156—164.
2. Hirt C. W., Amsden A. A., Cook J. L. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds // J. Comp. Phys. 1974. Vol. 14, No 3. P. 227—253.
3. Годунов С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Математический сборник. 1959. Т. 47, № 3. С. 271—306.
Godunov S. K. Raznostny metod chislennogo rascheta razryvnykh resheniy uravneniy gidrodinamiki // Matematicheskiy sbornik. 1959. T. 47, N 3. S. 271—306.
4. Бондаренко Ю. А., Башуров В. В., Янчилкин Ю. В. Математические модели и численные методы для решения задач нестационарной газовой динамики. Обзор зарубежной литературы: Препринт № 88-2003. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003.
Bondarenko Yu. A., Bashurov V. V., Yanilkin Yu. V. Matematicheskie modeli i chislennye metody dlya resheniya zadach nestatsionarnoy gazovoy dinamiki. Obzor zarubezhnoy literatury: Preprint N 88-2003. Sarov: RFYaTs-VNIEEF, 2003.
5. Стенин А. М., Бондаренко Ю. А., Матвеев Ю. М., Сараев В. А., Трофимова Л. Я. Методика расчета газодинамических течений с выделением контактных границ между веществами, не совпадающих с линиями сетки (методика ВКЛ) // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики. Тез. докл. 11-й Всерос. конф., посвященной памяти К. И. Бабенко / Под ред. А. В. Забродина, А. М. Молчанова, В. М. Тихомирова. Пущино, 5—9 октября 1996 г. Пущино, 1996. С. 65.
Stenin A. M., Bondarenko Yu. A., Matveev Yu. M., Saraev V. A., Trofimova L. Ya. Metodika rascheta gazodinamicheskikh techeniy s vydeleniem kontaktnykh granits mezhdu veshchestvami, ne sovpadayushchikh s liniyami setki (metodika VKL) // Teoreticheskie osnovy i konstruirovaniye chislennykh algoritmov resheniya zadach matematicheskoy fiziki. Tez. dokl. 11-y Vseros. konf., posvyashchennoy pamyati K. I. Babenko / Pod red. A. V. Zabrodina, A. M. Molchanova, V. M. Tikhomirova. Pushchino, 5—9 oktyabrya 1996 g. Pushchino, 1996. S. 65.
6. Стенин А. М., Спиридонов В. Ф., Воронина Е. Б., Шкарубский В. В. Методика ЛЭГАК-ВКЛ численного моделирования двумерных газодинамических течений многокомпонентных сред с выделением контактных границ, не совпадающих с линиями сетки // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2010. Вып. 15. С. 154—169.
Stenin A. M., Spiridonov V. F., Voronina E. B., Shkarubskiy V. V. Metodika LEGAK-VKL chislennogo modelirovaniya dvumernykh gazodinamicheskikh techeniy mnogokomponentnykh sred s vydeleniem kontaktnykh granits, ne sovpadayushchikh s liniyami setki // Trudy RFYaTs-VNIEEF. 2010. Вып. 15. S. 154—169.
7. Головизнин В. М., Рязанов М. А., Самарский А. А., Сороковикова О. С. Разностные схемы со сбалансированными аппроксимациями конвективных потоков: Препринт № 56. М.: ИПМ АН СССР, 1984.
Goloviznin V. M., Ryazanov M. A., Samarskiy A. A., Sorokovikova O. S. Raznostnye skhemy so sbalansirovannymi approksimatsiyami konvektivnykh potokov: Preprint N 56. Moskva: IPM AN SSSR, 1984.

8. Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бахрах С. М., Величко С. В., Володина Н. А., Воробьева Н. М., Егоршин С. П., Есаева Е. Н., Ковалёва А. Д., Лучинин М. В., Проневич С. Н., Спиридонов В. Ф., Тарадай И. Ю., Тарасова А. Н., Шувалова Е. В. Комплекс программ ЛЭГАК для расчета нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы реализации комплекса на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 3. С. 14–18.
Avdeev P. A., Artamonov M. V., Bakhrakh S. M., Velichko S. V., Volodina N. A., Vorobeva N. M., Egorshin S. P., Esaeva E. N., Kovaleva A. D., Luchinin M. V., Pronovich S. N., Spiridonov V. F., Taraday I. Yu., Tarasova A. N., Shuvalova E. V. Kompleks programm LEGAK dlya rascheta nestatsionarnykh techeniy mnogokomponentnoy sploshnoy sredy i printsipy realizatsii kompleksa na mnogoprotsessornykh EVM s raspredelennoy pamyatyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2001. Vyp. 3. S. 14–18.
9. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные схемы газовой динамики. М.: Наука, 1975.
Samarskiy A. A., Popov Yu. P. Raznostnye skhemy gazovoy dinamiki. M.: Nauka, 1975.
10. Бондаренко Ю. А. Порядок аппроксимации, порядок численной сходимости и экономичность счета многомерной газовой динамики в переменных Эйлера на примере расчетов на сходимость задачи "Blast waves" // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 51–61.
Bondarenko Yu. A. Poryadok approksimatsii, poryadok chislennoy skhodimosti i ekonomichnost scheta mnogomernoy gazovoy dinamiki v peremennykh Eylera na primere raschetov na skhodimost zadachi "Blast waves" // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2004. Vyp. 4. S. 51–61.
11. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. М.: ГИТТЛ, 1957.
Sedov L. I. Metody podobiya i razmernosti v mekhanike. M.: GITTL, 1957.
12. Ландау Л. Д., Lifshits E. M. Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
Landau L. D., Lifshits E. M. Teoreticheskaya fizika. T. VI. Hidrodinamika. M.: Nauka, 1986.

Статья поступила в редакцию 03.12.18.

CONSERVATIVE REMAPPING IN GAS-DYNAMIC DIFFERENCE SCHEMES ON LAGRANGIAN-EULERIAN MESHES / A. M. Stenin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod Region).

The paper describes a conservative-in-total-energy global remapping algorithm for the Eulerian stage of the time step in gas-dynamic difference schemes on regular tetragonal Lagrangian-Eulerian spatial meshes. The values of the gas-dynamic quantities are remapped with conservation of the respective integral values. The values of specific internal energy are remapped subject to the conservation of the integral internal energy with corrections that provide total energy conservation. If a fully conservative difference scheme is used at the Lagrangian time-step stage, then the conservative remapping renders the whole scheme fully conservative at both Lagrangian and Eulerian stages. The results of benchmark computations of a strong point explosion are presented.

Keywords: gas dynamics, Lagrangian-Eulerian meshes, remapping, a fully conservative scheme, the Sedov blast.

УДК 517.958:536.2

TVDR-СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. А. Шестаков
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

Проведены исследования по построению неявных безусловно монотонных разностных схем повышенного порядка аппроксимации для уравнения переноса теплового излучения.

Ключевые слова: уравнение переноса излучения, разностные схемы.

Введение

Проблеме построения численных методов решения уравнения переноса излучения посвящено огромное число работ (см., например, [1] и приведенные там ссылки). Отдельно среди них выделяются методы решения системы уравнений переноса теплового излучения (СУПТИ), которая дополнительно включает в себя уравнение для внутренней энергии среды с учетом обменных процессов взаимодействия излучения с веществом (см., например, [2–5]). Из-за существенной нелинейности этих процессов при решении задачи СУПТИ предъявляются высокие требования к качеству выбираемых численных методик.

Во-первых, эти методики должны обладать эффективным методом разрешения нелинейности данной задачи (см., например, [6, 7]). Во-вторых, из-за семимерного пространства всех переменных аппроксимационная система должна решаться экономичным методом, в котором число арифметических операций пропорционально количеству узлов разностной сетки (например, маршевыми алгоритмами: прогонкой или бегущим счетом). В-третьих, разностная дискретизация, кроме естественных условий — аппроксимации, абсолютной устойчивости и сходимости, должна удовлетворять дополнительным требованиям: консервативности, безусловной монотонности и положительности для положительных функций.

Если аппроксимация и сходимость выполняются для большинства используемых схем, то из требования абсолютной устойчивости вытекает использование только неявных схем, а из требования консервативности — аппроксимация в дивергентной форме. Требование безусловной монотонности ограничивает точность линейных схем первым порядком аппроксимации по времени и пространству даже в простейшем случае одномерного уравнения переноса (УП): $\frac{\partial J}{\partial t} + c \frac{\partial J}{\partial x} = 0$ [8]. В схемах второго порядка аппроксимации осцилляции обычно порождаются третьей производной в первом дифференциальном приближении (ПДП) [9]. Это следует из свойств уравнения Кордевега де Вриза [10]. Поэтому в области переноса теплового излучения до сих пор остается актуальной проблема построения монотонных схем повышенного (выше первого) порядка аппроксимации. Основные проблемы численных схем СУПТИ изложены в работе [11].

Попытки построить монотонные линейные схемы повышенного порядка аппроксимации хотя бы по одной из переменных, например первого порядка по времени и более высокого по пространству, приводят к возникновению ограничений на временной шаг (см., например, [12]). Барьер безусловной монотонности Годунова не удается преодолеть даже по отдельным переменным. Автор не нашел в литературе безусловно монотонных линейных схем для УП с порядком $O(\tau + h^2)$ или $O(\tau^2 + h)$,

где τ — шаг по времени, h — шаг по пространству. Поэтому для повышения порядка аппроксимации используют нелинейные схемы, в которых применяют различные алгоритмы монотонизации. Однако в большинстве случаев они также теряют свойство безусловной монотонности. Можно привести несколько примеров:

1. В работах О. М. Белоцерковского с соавторами (см., например, [13]) построена явная (монотонная при условии на число Куранта $C = \frac{c\tau}{h} \leq 1$) нелинейная схема второго порядка аппроксимации по времени и пространству за счет изменения разностного шаблона при анализе первых и вторых разностных производных.
2. В работах Б. В. Рогова и М. Н. Михайловской (см., например, [14]) построена неявная схема третьего порядка аппроксимации по времени и четвертого — по пространству (монотонная при $C \geq 0,5$).
3. В работах В. И. Пинчукова (см., например, [15]) построены неявные схемы до шестого порядка аппроксимации по времени и пространству (монотонные при $C \leq 0,5$).
4. В работах М. Ю. Козманова с соавторами [16–18] построены условно монотонные нелинейные схемы второго порядка аппроксимации по пространству за счет поправки разностного оператора при анализе вторых разностных производных.

Следует заметить, что вышеперечисленные схемы из первых трех примеров дают повышенный порядок аппроксимации только для простейшего одномерного УП, который может снижаться при использовании их для уравнения переноса излучения более сложного вида с учетом процессов рассеяния и поглощения. При этом может теряться монотонность. Например, в схемах второго порядка аппроксимации по пространству в DS_n -методе Карлсона [19] осцилляции порождаются отрицательной второй производной $-\alpha h^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2}$ в ПДП при коэффициенте поглощения α .

Достаточно простой способ преодоления барьера Годунова в 1962 г. предложил Р. П. Федоренко [20]: в областях немонотонности решения применять монотонные линейные схемы первого порядка, а на гладких участках — схемы более высокого порядка. Этот прием достаточно эффективен в явных схемах и схемах бегущего счета, когда переключение происходит при последовательном расчете ячеек. Такие схемы в дальнейшем стали называть гибридными, однако при решении неявных гиперболических систем (например, прогонкой) необходимо априорное определение точек переключения, что не всегда возможно. Если эту информацию брать с предыдущего шага или итерации, то на искомой итерации возможно нарушение монотонности. Так как переключатель между схемами зависит от поведения решения, такие схемы становятся нелинейными. Построение гибридных схем для монотонизации решения используется во многих областях; например, в задачах переноса это WDD-схема [21] или DDAD/St-схема [22]. Если построение гибридных схем в одномерном случае не вызывает особых трудностей, то в многомерном случае этот прием "упирается" в неопределенность понятия монотонности. В многомерном случае критерий монотонности обычно заменяют принципом максимума в ячейке или требованием положительности для положительных функций. При этом гибридные схемы могут порождать немонотонность в области положительности решения, немонотонность по времени и несходимость итераций из-за переключений с одной схемы на другую [23].

Итак, перечислим основные требования к разностным схемам для СУПТИ.

Для всех схем (не только для схем СУПТИ) обязательны:

- 1) аппроксимация;
- 2) устойчивость (безусловная для схем СУПТИ);
- 3) сходимость.

Для схем СУПТИ необходимы:

- 4) консервативность;
- 5) положительность (для положительных функций);
- 6) безусловная монотонность (в одномерных задачах).

Для схем СУПТИ желательны:

- 7) экономичность (простота алгоритма, как, например, у маршевых методов);
- 8) обобщаемость на многомерный случай;
- 9) выполнение сферической симметрии (см., например, [24]);
- 10) обеспечение асимптотического диффузионного предела при использовании метода сферических гармоник (см., например, [25]);
- 11) обеспечение P_1 -предела при использовании кинетического приближения.

Всем одиннадцати условиям пока не удовлетворяет ни одна методика для решения СУПТИ в кинетическом приближении. Однако при решении СУПТИ в упрощенных приближениях можно снять некоторые требования на выбор схем.

Первым девяти условиям удовлетворяет, например, методика [26], созданная для решения СУПТИ в приближении лучистой теплопроводности. Первым десяти условиям удовлетворяет методика [27], созданная для решения СУПТИ в P_1 -приближении. Девяти условиям (без условий 9, 10) удовлетворяют, например, методика [28], созданная для решения СУПТИ в кинетическом приближении, и разностные схемы, рассмотренные в данной работе.

Еще одним вопросом при построении разностных схем для СУПТИ является выбор разностного шаблона. В многомерных задачах для сохранения порядка аппроксимации на существенно неортогональных сетках применяют схемы, построенные в рамках одноячеечного шаблона, которые в последнее время стали называть бикомпактными [29]. Популярность этого класса объясняется тем, что для данных схем выполняется ряд важных свойств:

- 1) это самый простой шаблон, поэтому сравнительно просто схемы обобщаются на многомерный случай без расширения шаблона (шаблон трехточечной схемы в двумерной геометрии требует 9 ячеек, в трехмерной — 27 ячеек);
- 2) схемы, записанные в дивергентной форме и построенные интегроинтерполяционным способом в рамках одноячеечного шаблона, будут всегда консервативны;
- 3) порядок аппроксимации не меняется при переходе от равномерных и ортогональных сеток к неравномерным и неортогональным;
- 4) легко аппроксимируются граничные условия (не надо вводить фиктивные ячейки на границах);
- 5) нет необходимости аппроксимировать решение через разрыв, как в многоточечных схемах;
- 6) легко строится контур консервативности для доказательства локальной консервативности в системе, что важно для систем гиперболических уравнений.

Одним из наиболее популярных путей преодоления барьера Годунова является переход к нелинейным TVD-схемам (Total Variation Diminishing), начало которым положил В. П. Колган [30]. В настоящее время опубликовано большое количество работ (более 1 000) по TVD-схемам (см., например, [31]), где рассмотрены как явные, так и неявные схемы типа TVD для решения гиперболических систем уравнений. Если рассматривать только неявные TVD-схемы (с учетом требования безусловной устойчивости), то это будут трехточечные или четырехточечные схемы из-за использования односторонних производных в каждом направлении пространственной переменной. Это значит, что теряется важное достоинство одного из самых эффективных методов решения уравнения переноса — DS_n -метода, где аппроксимация строится в рамках счетной ячейки, а для решения разностных уравнений используется экономичный метод бегущего счета.

В работах [32, 33] были найдены способы, как избежать указанных трудностей в TVD-методологии. В этих работах построены неявные схемы типа TVD, которые сохраняют основные достоинства DS_n -метода. Доказательство принадлежности этих схем к TVD-схемам затруднено из-за применения линеаризации, поэтому в работе [34], где они рассмотрены для системы гиперболических уравнений, такие схемы названы TVDR (Total Variation Diminishing Reconstruction). В работах [35, 36] построены TVDR-схемы, у которых, в отличие от [29–32], вся добавка от TVD-реконструкции взята с предыдущего шага. Это заметно упрощает схемы, особенно в многомерном случае.

Для систем гиперболических уравнений TVD-реконструкцию можно проводить как для инвариантов Римана [37–39], так и для основных величин (например, плотности и потока излучения) [40, 41]. TVDR-схемы, построенные на TVD-реконструкции инвариантов, опираются на свойство монотонности инвариантов в одномерной плоской геометрии [42], но в более сложных геометриях (например, сферически-симметричной или цилиндрически-симметричной) отсутствие инвариантов не позволяет пользоваться этим подходом. Поэтому класс TVDR-схем был расширен за счет применения TVD-реконструкции к остальным величинам, которые могут вести себя немонотонно [40]. Такой подход существенно упростил построение TVDR-схем в многомерных геометриях [41].

Построенные указанным способом TVDR-схемы обладают следующими свойствами:

- 1) неявность, безусловная устойчивость;
- 2) первый порядок аппроксимации по времени и второй порядок — по пространству, кроме отдельных точек с экстремумами;
- 3) консервативность;
- 4) однородность, заключающаяся в проведении расчета по единообразным формулам без явного выделения особенностей решения;
- 5) аппроксимация в рамках одной ячейки, если иметь в виду значения величин с верхнего временного слоя, что позволяет применять экономичный метод бегущего счета для решения системы разностных уравнений;
- 6) обобщаемость на многомерные геометрии.

Построение неявных схем для модельного уравнения переноса

Рассмотрим построение монотонных схем повышенного порядка аппроксимации для линейного УП в одномерной плоской геометрии

$$\frac{1}{c} \frac{\partial J}{\partial t} + \mu \frac{\partial J}{\partial x} + \alpha J = 0, \quad (1)$$

где $J(x, t)$ — неотрицательная функция; μ — направляющий косинус в пространстве полета частиц; x — пространственная координата; t — время; c — скорость света; α — некоторая неотрицательная константа. Уравнение (1) дополняется начальными и граничными условиями

$$J^0(x, t^0) = J^0(x); \quad J(x_L, t) |_{\mu > 0} = J_L(t); \quad J(x_R, t) |_{\mu < 0} = J_R(t).$$

Неявная схема в рамках одноячеечного шаблона для уравнения (1) имеет вид

$$\frac{J_{i+1/2}^{n+1} - J_{i+1/2}^n}{c\tau} + \mu \frac{J_{i+1}^{n+1} - J_i^{n+1}}{h} + \alpha J_{i+1/2}^{n+1} = 0, \quad (2)$$

где $\tau = t^{n+1} - t^n$; $h = x_{i+1} - x_i$; $i = 0, \dots, I$; $n = 0, 1 \dots$. Для упрощения изложения в дальнейшем предполагается $\tau = \text{const}$, $h = \text{const}$. Величина с целыми нижними индексами $J_i^{n+1} = J(x_i, t^{n+1})$ используется для значений искомой функции в узлах разностной сетки. Значения величины с полуцелыми нижними индексами $J_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{h} \int_{x_i}^{x_{i+1}} J(x, t^{n+1}) dx$ есть интегральные средние значения функции в ячейках и отличаются от ее значений в центрах ячеек $J(x_{i+1/2}, t^{n+1})$ на $O(h^m)$ в зависимости от используемой квадратуры, где m — порядок квадратурной формулы.

Уравнение (2) можно записать в более компактном виде:

$$q J_{i+1/2}^{n+1} + C \Delta J_i^{n+1} = J_{i+1/2}^n, \quad q = 1 + c\tau\alpha \geq 1, \quad C = \frac{c\tau\mu}{h}, \quad \Delta J_i^{n+1} = J_{i+1}^{n+1} - J_i^{n+1}. \quad (3)$$

Схема с дополнительными соотношениями связи

$$J_{i+1/2}^{n+1} = J_{i+1}^{n+1} \quad \text{при} \quad \mu > 0; \quad J_{i+1/2}^{n+1} = J_i^{n+1} \quad \text{при} \quad \mu \leq 0 \quad (4)$$

является монотонной положительной схемой первого порядка аппроксимации. В теории переноса эта схема называется противопотоковой, а в DS_n -методе — St-схемой.

Подставляя соотношения связи (4) в уравнение (3), получаем

$$(q + C)J_{i+1/2}^{n+1} = J_{i+1/2}^n + CJ_i^{n+1} \quad \text{при } \mu > 0; \quad (q - C)J_{i+1/2}^{n+1} = J_{i+1/2}^n - CJ_{i+1}^{n+1} \quad \text{при } \mu \leq 0. \quad (5)$$

Из системы (5) можно получить принцип максимума в ячейке: $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J_i^{n+1}, J_{i+1/2}^n)$ при $\mu > 0$ и $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J_{i+1}^{n+1}, J_{i+1/2}^n)$ при $\mu \leq 0$. Из этих неравенств получается принцип максимума для всей задачи: $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J^0, J_L, J_R)$.

Если схему (5) записать отдельно для целых и полуцелых индексов,

$$\begin{aligned} J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{q+C}J_{i+1/2}^n + \frac{C}{q+C}J_{i-1/2}^{n+1}, & J_{i+1}^{n+1} &= \frac{1}{q+C}J_{i+1}^n + \frac{C}{q+C}J_i^{n+1} \quad \text{при } \mu > 0; \\ J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{q-C}J_{i+1/2}^n - \frac{C}{q-C}J_{i+3/2}^{n+1}, & J_i^{n+1} &= \frac{1}{q-C}J_i^n - \frac{C}{q-C}J_{i+1}^{n+1} \quad \text{при } \mu \leq 0, \end{aligned}$$

то видно, что выполняется условие невозрастания J как в узлах, так и по интегральной средней величине:

$$\begin{aligned} 0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J_{i-1/2}^{n+1}, J_{i+1/2}^n), & \quad 0 \leq J_{i+1}^{n+1} \leq \max(J_i^{n+1}, J_{i+1}^n) \quad \text{при } \mu > 0; \\ 0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J_{i+3/2}^{n+1}, J_{i+1/2}^n), & \quad 0 \leq J_i^{n+1} \leq \max(J_{i+1}^{n+1}, J_i^n) \quad \text{при } \mu \leq 0, \end{aligned}$$

и схема является безусловно устойчивой в норме C .

Если St-схему записать через разности значений в двух соседних точках,

$$\begin{aligned} \Delta J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{q+C}\Delta J_{i+1/2}^n + \frac{C}{q+C}\Delta J_{i-1/2}^{n+1}, & \Delta J_{i+1}^{n+1} &= \frac{1}{q+C}\Delta J_{i+1}^n + \frac{C}{q+C}\Delta J_i^{n+1} \quad \text{при } \mu > 0; \\ \Delta J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{q-C}\Delta J_{i+1/2}^n - \frac{C}{q-C}\Delta J_{i+3/2}^{n+1}, & \Delta J_i^{n+1} &= \frac{1}{q-C}\Delta J_i^n - \frac{C}{q-C}\Delta J_{i+1}^{n+1} \quad \text{при } \mu \leq 0, \end{aligned}$$

то:

– для $\mu > 0$

из $\Delta J_{i+1/2}^n \geq 0$, $\Delta J_{i-1/2}^{n+1} \geq 0$ следует $\Delta J_{i+1/2}^{n+1} \geq 0$;

из $\Delta J_{i+1}^n \geq 0$, $\Delta J_i^{n+1} \geq 0$ следует $\Delta J_{i+1}^{n+1} \geq 0$;

из $\Delta J_{i+1/2}^n < 0$, $\Delta J_{i-1/2}^{n+1} < 0$ следует $\Delta J_{i+1/2}^{n+1} < 0$;

из $\Delta J_{i+1}^n < 0$, $\Delta J_i^{n+1} < 0$ следует $\Delta J_{i+1}^{n+1} < 0$;

– для $\mu \leq 0$

из $\Delta J_{i+1/2}^n \geq 0$, $\Delta J_{i+3/2}^{n+1} \geq 0$ следует $\Delta J_{i+1/2}^{n+1} \geq 0$;

из $\Delta J_i^n \geq 0$, $\Delta J_{i+1}^{n+1} \geq 0$ следует $\Delta J_i^{n+1} \geq 0$;

из $\Delta J_{i+1/2}^n < 0$, $\Delta J_{i+3/2}^{n+1} < 0$ следует $\Delta J_{i+1/2}^{n+1} < 0$;

из $\Delta J_i^n < 0$, $\Delta J_{i+1}^{n+1} < 0$ следует $\Delta J_i^{n+1} < 0$,

т. е. St-схема является монотонной по критерию Годунова как в узлах, так и по интегральной средней величине.

Полунеявная TVDR-схема

Если ввести традиционные для TVD-схем функции-ограничители

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2} &= \frac{L(\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2})}{\Delta J_{i-1/2}} = L(1, \hat{\theta}_{i+1/2}), & \hat{\theta}_{i+1/2} &= \frac{\Delta J_{i+1/2}}{\Delta J_{i-1/2}}; \\ \psi_{i+1/2} &= \frac{L(\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2})}{\Delta J_{i+1/2}} = L(1, \theta_{i+1/2}), & \theta_{i+1/2} &= \frac{\Delta J_{i-1/2}}{\Delta J_{i+1/2}},\end{aligned}$$

то можно записать

$$J_{i+1}^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} + 0,5\phi_{i+1/2}^{n+1}\Delta J_{i-1/2}^{n+1} \text{ при } \mu > 0; \quad J_i^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} - 0,5\psi_{i+1/2}^{n+1}\Delta J_{i+1/2}^{n+1} \text{ при } \mu \leq 0, \quad (6)$$

где $\Delta J_{i-1/2} = J_{i+1/2} - J_{i-1/2}$; L — некоторый ограничитель.

Уравнения (3), (6) представляют собой систему с четырехточечным шаблоном на $(n+1)$ -м слое. Так как функции-ограничители имеют дробно-линейный характер, то можно ожидать, что они слабо меняются за один шаг τ . Таким образом, можно их взять с предыдущего шага, внося при этом погрешность $O(\tau)$. Это дает возможность применить алгоритм бегущего счета. Тогда подстановка соотношений (6) с учетом ϕ^n, ψ^n в уравнение (3) приводит к системе уравнений

$$\begin{aligned}J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{J_{i+1/2}^n C J_i^{n+1} + 0,5 C \phi_{i+1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1}}{q + C + 0,5 C \phi_{i+1/2}^n}, & J_{i+1}^{n+1} &= \left(1 + 0,5 \phi_{i+1/2}^n\right) J_{i+1/2}^{n+1} - \\ & & & - 0,5 \phi_{i+1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1} \quad \text{при } \mu > 0; \\ J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{J_{i+1/2}^n - C J_{i+1}^{n+1} - 0,5 C \psi_{i+1/2}^n J_{i+3/2}^{n+1}}{q - C - 0,5 C \psi_{i+1/2}^n}, & J_i^{n+1} &= \left(1 + 0,5 \psi_{i+1/2}^n\right) J_{i+1/2}^{n+1} - \\ & & & - 0,5 \psi_{i+1/2}^n J_{i+3/2}^{n+1} \quad \text{при } \mu \leq 0,\end{aligned} \quad (7)$$

которые имеют при $\mu > 0$ разрешенный вид относительно $J_{i+1/2}^{n+1}, J_{i+1}^{n+1}$ (по этим формулам можно вести рекуррентный счет в сторону роста индекса i), а при $\mu \leq 0$ — разрешенный вид относительно $J_{i+1/2}^{n+1}, J_i^{n+1}$ (счет в сторону убывания индекса i). Хотя эта схема позволяет применять бегущий счет для решения системы разностных уравнений, аппроксимация строится в рамках трех соседних ячеек, если иметь в виду значения величины с предыдущего временного слоя, и в рамках двух ячеек, если иметь в виду ее значения с верхнего временного слоя. Построенная полунеявная TVDR-схема (7) является консервативной, так как при суммировании по всем ячейкам для $\mu > 0$ получаем

$$\begin{aligned}\sum_i \Delta J_i^{n+1} &= \sum_i \left(J_{i+1/2}^{n+1} + 0,5 \phi_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^{n+1} - J_{i-1/2}^{n+1} - 0,5 \phi_{i-1/2}^n \Delta J_{i-3/2}^{n+1} \right) = \\ &= J_{i-1/2}^{n+1} + 0,5 \phi_{i-1/2}^n \Delta J_{i-3/2}^{n+1} - J_{1/2}^{n+1} - 0,5 \phi_{1/2}^n \Delta J_{3/2}^{n+1} = J_I^{n+1} - J_0^{n+1}.\end{aligned}$$

Для $\mu \leq 0$ консервативность показывается аналогично.

Из формул (7) для $\phi_{i+1/2}^n \geq 0, \mu > 0$ следует условие положительности $J_{i+1/2}^{n+1}$ при положительности $J_{i+1/2}^n, J_i^{n+1}, J_{i-1/2}^{n+1}$ и в центральной точке выполняется условие $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J_{i+1/2}^n, J_i^{n+1}, J_{i-1/2}^{n+1})$, которое, к сожалению, не гарантирует положительности в узле J_{i+1}^{n+1} . Поэтому при $J_{i+1}^{n+1} < 0$ полагается $\phi_{i+1/2}^n = 0$ и счет в данной ячейке проводится по схеме первого порядка. При такой реализации можно получить принцип максимума по интегральной средней величине для всех временных шагов:

$$\begin{aligned}J_{i+1/2}^{n+1} &\leq \frac{\max_{n,i} \left(J_i^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1} \right)}{q + C + 0,5 C \phi_{i+1/2}^n} + \frac{C \max_{n,i} \left(J_i^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1} \right)}{q + C + 0,5 C \phi_{i+1/2}^n} + \frac{0,5 C \phi_{i+1/2}^n \max_{n,i} \left(J_i^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1} \right)}{q + C + 0,5 C \phi_{i+1/2}^n} \leq \\ &\leq \max_{n,i} \left(J_i^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1} \right).\end{aligned} \quad (8)$$

Из формул (7) для $\psi_{i+1/2}^n \geq 0$, $\mu \leq 0$ следует условие положительности $J_{i+1/2}^{n+1}$ при положительности $J_{i+1/2}^n$, J_{i+1}^{n+1} , $J_{i+3/2}^{n+1}$ и в центральной ячейке выполняется условие $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J_{i+1/2}^n, J_{i+1}^{n+1}, J_{i+3/2}^{n+1})$, которое не гарантирует положительности в узле J_i^{n+1} . Поэтому при $J_i^{n+1} < 0$ полагается $\psi_{i+1/2}^n = 0$ и счет в данной ячейке проводится по схеме первого порядка. При такой реализации можно получить принцип максимума по интегральной средней величине для $\mu \leq 0$:

$$J_{i+1/2}^{n+1} \leq \frac{\max_{n,i}(J_{i+1}^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1})}{q - C - 0,5C\psi_{i+1/2}^n} + \frac{|C| \max_{n,i}(J_{i+1}^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1})}{q - C - 0,5C\psi_{i+1/2}^n} + \frac{0,5|C| \psi_{i+1/2}^n \max_{n,i}(J_{i+1}^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1})}{q - C - 0,5C\psi_{i+1/2}^n} \leq \max_{n,i}(J_{i+1}^{n+1}, J_{i+1/2}^{n+1}). \quad (9)$$

Из неравенств (8), (9) можно получить принцип максимума по интегральной средней величине для всей задачи: $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J^0, J_L, J_R)$.

Если схему (7) при $\mu > 0$ записать через разности значений J в двух соседних ячейках,

$$\begin{aligned} (q + C)\Delta J_{i+1/2}^{n+1} + 0,5C \left(\phi_{i+3/2}^n J_{i+3/2}^{n+1} - \phi_{i+1/2}^n J_{i+1/2}^{n+1} \right) &= \\ &= \Delta J_{i+1/2}^n + C\Delta J_i^{n+1} + 0,5C \left(\phi_{i+3/2}^n J_{i+1/2}^{n+1} - \phi_{i+1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1} \right), \\ \Delta J_i^{n+1} &= \Delta J_{i-1/2}^{n+1} + 0,5\phi_{i+1/2}^n J_{i+1/2}^{n+1} - 0,5\phi_{i+1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1} - 0,5\phi_{i-1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1} + 0,5\phi_{i-1/2}^n J_{i-3/2}^{n+1}, \end{aligned}$$

и ввести новые функции-ограничители

$$\phi_{i+1/2}^1 = \frac{\phi_{i+3/2}^n J_{i+3/2}^{n+1} - \phi_{i+1/2}^n J_{i+1/2}^{n+1}}{\Delta J_{i+1/2}^{n+1}}; \quad \phi_{i+1/2}^2 = \frac{\phi_{i+3/2}^n J_{i+1/2}^{n+1} - \phi_{i+1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta J_{i-1/2}^{n+1}},$$

то получаем

$$\begin{aligned} \Delta J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{\Delta J_{i+1/2}^n + C\Delta J_i^{n+1} + 0,5C\phi_{i+1/2}^2 \Delta J_{i-1/2}^{n+1}}{q + C + 0,5C\phi_{i+1/2}^1}; \\ \Delta J_i^{n+1} &= \left(1 + 0,5\phi_{i-1/2}^1 \right) \Delta J_{i-1/2}^{n+1} - 0,5\phi_{i-1/2}^2 \Delta J_{i-3/2}^{n+1}. \end{aligned}$$

При условиях $\phi_{i+1/2}^1 \geq 0$, $\phi_{i+1/2}^2 \geq 0$, $\phi_{i-1/2}^1 \Delta J_{i-1/2}^{n+1} \geq \phi_{i-1/2}^2 \Delta J_{i-3/2}^{n+1}$ можно показать монотонность по расширенному критерию (как по узлам, так и по интегральным средним) для $\mu > 0$:

из $\Delta J_{i+1/2}^n \geq 0$, $\Delta J_i^{n+1} \geq 0$, $\Delta J_{i-1/2}^{n+1} \geq 0$, $\phi_{i+1/2}^1 \geq 0$, $\phi_{i+1/2}^2 \geq 0$ следует $\Delta J_{i+1/2}^{n+1} \geq 0$;

из $\Delta J_{i-1/2}^{n+1} \geq 0$, $\phi_{i-1/2}^1 \Delta J_{i-1/2}^{n+1} \geq \phi_{i-1/2}^2 \Delta J_{i-3/2}^{n+1}$ следует $\Delta J_i^{n+1} \geq 0$;

из $\Delta J_{i+1/2}^n < 0$, $\Delta J_i^{n+1} < 0$, $\Delta J_{i-1/2}^{n+1} < 0$, $\phi_{i+1/2}^1 \geq 0$, $\phi_{i+1/2}^2 \geq 0$ следует $\Delta J_{i+1/2}^{n+1} < 0$;

из $\Delta J_{i-1/2}^{n+1} < 0$, $\phi_{i-1/2}^1 \Delta J_{i-1/2}^{n+1} < \phi_{i-1/2}^2 \Delta J_{i-3/2}^{n+1}$ следует $\Delta J_i^{n+1} < 0$.

Аналогично, если ввести функции-ограничители

$$\psi_{i+1/2}^1 = \frac{\psi_{i+3/2}^n J_{i+3/2}^{n+1} - \psi_{i+1/2}^n J_{i+1/2}^{n+1}}{\Delta J_{i+1/2}^{n+1}}; \quad \psi_{i+1/2}^2 = \frac{\psi_{i+3/2}^n J_{i+5/2}^{n+1} - \psi_{i+1/2}^n J_{i+3/2}^{n+1}}{\Delta J_{i+3/2}^{n+1}},$$

то при условиях $\psi_{i+1/2}^1 \Delta J_{i+1/2}^{n+1} \geq \psi_{i+1/2}^2 \Delta J_{i+3/2}^{n+1}$, $\psi_{i+1/2}^1 \geq 0$, $\psi_{i+1/2}^2 \geq 0$ можно показать монотонность по расширенному критерию для $\mu \leq 0$.

Несмотря на то, что схема (7) построена по классической TVD-методологии, доказать ее принадлежность классу TVD не удастся. Причина состоит в линеаризации функций-ограничителей и взятии их с предыдущего временного слоя (или итерации). Но схему (7) можно модифицировать так, чтобы она стала неявной TVD-схемой. Для этого надо привести схему (7) при $\mu > 0$ к виду

$$qJ_{i+1/2}^{n+1} + C \left(1 + 0,5\phi_{i+1/2}^n - 0,5\phi_{i-1/2}^n \theta_{i-1/2}^{n+1} \right) \Delta J_{i-1/2}^{n+1} = J_{i+1/2}^n.$$

Заменяя в этом уравнении $\theta_{i-1/2}^{n+1}$ на $\theta_{i-1/2}^n$, получаем модифицированную схему

$$qJ_{i+1/2}^{n+1} + CA_{i-1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^{n+1} = J_{i+1/2}^n, \quad (10)$$

которая при $A_{i-1/2}^n = 1 + 0,5\phi_{i+1/2}^n - 0,5\phi_{i-1/2}^n \theta_{i-1/2}^n \geq 0$ принадлежит классу TVD.

Если TVD-схему (10) записать через разности значений J в двух соседних ячейках $q\Delta J_{i+1/2}^{n+1} + CA_{i+1/2}^n \Delta J_{i+1/2}^{n+1} - CA_{i-1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^{n+1} = \Delta J_{i+1/2}^n$, то получаем $\Delta J_{i+1/2}^{n+1} = \frac{\Delta J_{i+1/2}^n + CA_{i-1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^{n+1}}{q + CA_{i+1/2}^n}$, откуда при условиях $A_{i-1/2}^n \geq 0$, $A_{i+1/2}^n \geq 0$ следует монотонность по Годунову. Уравнение (10) можно записать в виде

$$J_{i+1/2}^{n+1} = \frac{J_{i+1/2}^n + CA_{i-1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1}}{q + CA_{i+1/2}^n},$$

откуда следует положительность решения при $A_{i-1/2}^n \geq 0$, $J_{i+1/2}^n \geq 0$, $J_{i-1/2}^{n+1} \geq 0$ и выполняется принцип максимума по интегральной средней величине: $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max \left(J_{i+1/2}^n, J_{i-1/2}^{n+1} \right)$.

Из неравенства $A_{i-1/2}^n \geq 0$ получаем $\phi_{i-1/2}^n \leq \left(2 + \phi_{i+1/2}^n \right) \hat{\theta}_{i-1/2}^n$, откуда при $\phi_{i+1/2}^n \geq 0$ следует условие на функцию-ограничитель ϕ :

$$0 \leq \phi_{i-1/2} \leq 2\hat{\theta}_{i-1/2}. \quad (11)$$

Аналогично можно модифицировать схему (7) при $\mu \leq 0$. В этом случае получаем

$$qJ_{i+1/2}^{n+1} + C \left(1 + 0,5\psi_{i+1/2}^n - 0,5\psi_{i+3/2}^n \theta_{i+1/2}^{n+1} \right) \Delta J_{i+1/2}^{n+1} = J_{i+1/2}^n, \quad \theta_{i+1/2} = \frac{\Delta J_{i+3/2}}{\Delta J_{i+1/2}} = \hat{\theta}_{i+1/2}^{-1}.$$

Заменяя $\theta_{i+1/2}^{n+1}$ на $\theta_{i+1/2}^n$, получаем модифицированную схему

$$qJ_{i+1/2}^{n+1} + CB_{i+1/2}^n \Delta J_{i+1/2}^{n+1} = J_{i+1/2}^n, \quad (12)$$

которая при $B_{i+1/2}^n = 1 + 0,5\psi_{i+1/2}^n - 0,5\psi_{i+3/2}^n \theta_{i+1/2}^n \geq 0$ принадлежит классу TVD.

Уравнение (12) можно записать в виде

$$J_{i+1/2}^{n+1} = \frac{J_{i+1/2}^n - CB_{i+1/2}^n J_{i+3/2}^{n+1}}{q - CB_{i+1/2}^n},$$

откуда следует положительность решения при $B_{i+1/2}^n \geq 0$, $J_{i+1/2}^n \geq 0$, $J_{i+3/2}^{n+1} \geq 0$. Из неравенства $B_{i+1/2}^n \geq 0$ получаем $\psi_{i+3/2}^n \leq \left(2 + \psi_{i+1/2}^n \right) \hat{\theta}_{i+1/2}^n$, откуда при $\psi_{i+1/2}^n \geq 0$ следует условие на функцию-ограничитель ψ : $0 \leq \psi_{i+3/2} \leq 2\hat{\theta}_{i+1/2}$.

К сожалению, построенная TVD-схема (10)–(12) стала неконсервативной, так как $\sum_i A_{i-1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^{n+1} \neq \sum_i \Delta J_i^{n+1} = J_I^{n+1} - J_0^{n+1}$ при $\mu > 0$ и $\sum_i B_{i+1/2}^n \Delta J_{i+1/2}^{n+1} \neq \sum_i \Delta J_i^{n+1} = J_I^{n+1} - J_0^{n+1}$ при $\mu \leq 0$. Терять консервативность нежелательно, поэтому для численных расчетов рекомендуется использовать консервативную TVDR-схему (7), достоинствами которой являются:

- положительность при $\phi_{i+1/2}^n \geq 0$ и $\psi_{i+1/2}^n \geq 0$. При этом $\phi_{i+1/2}^n = 0$, если $J_{i+1}^{n+1} < 0$, и $\psi_{i+1/2}^n = 0$, если $J_i^{n+1} < 0$;

- условная монотонность как по значениям в узлах, так и по интегральным средним при $\phi_{i+1/2}^1 \geq 0$, $\phi_{i+1/2}^2 \geq 0$, $\psi_{i+1/2}^1 \geq 0$, $\psi_{i+1/2}^2 \geq 0$: в узлах функция J_i монотонно возрастает при $\phi_{i-1/2}^1 \Delta J_{i-1/2}^{n+1} \geq \phi_{i-1/2}^2 \Delta J_{i-3/2}^{n+1}$, $\psi_{i+1/2}^1 \Delta J_{i+1/2}^{n+1} \geq \psi_{i+1/2}^2 \Delta J_{i+3/2}^{n+1}$ или монотонно убывает при $\phi_{i-1/2}^1 \Delta J_{i-1/2}^{n+1} < \phi_{i-1/2}^2 \Delta J_{i-3/2}^{n+1}$, $\psi_{i+1/2}^1 \Delta J_{i+1/2}^{n+1} < \psi_{i+1/2}^2 \Delta J_{i+3/2}^{n+1}$;
- второй порядок аппроксимации по пространству, за исключением отдельных точек;
- возможность использования экономичного бегущего счета.

К недостаткам полунейвной TVDR-схемы можно отнести аппроксимацию в рамках трехточечного шаблона на искомом шаге, условную положительность и монотонность, а также непринадлежность классу TVD.

Мультипликативная TVDR-схема

В предыдущем разделе на примере построения полунейвной TVDR-схемы показана возможность применения TVD-методологии для неявных схем уравнения переноса излучения с сохранением бегущего счета. Особенностью предложенной полунейвной TVDR-схемы является использование трехточечного шаблона на искомом шаге, который в многомерном случае обладает определенными недостатками (см. Введение).

Построим TVDR-схему в рамках одной ячейки на искомом шаге. Если в уравнениях (6) вынести за скобку $J_{i+1/2}^{n+1}$, то соотношения связи примут вид

$$\begin{aligned} J_{i+1}^{n+1} &= \left(1 + \frac{L \left(\Delta J_{i-1/2}^{n+1}, \Delta J_{i+1/2}^{n+1} \right)}{2J_{i+1/2}^{n+1}} \right) J_{i+1/2}^{n+1} = (D^+)_{i+1/2}^{n+1} J_{i+1/2}^{n+1} \quad \text{при } \mu > 0; \\ J_i^{n+1} &= \left(1 - \frac{L \left(\Delta J_{i-1/2}^{n+1}, \Delta J_{i+1/2}^{n+1} \right)}{2J_{i+1/2}^{n+1}} \right) J_{i+1/2}^{n+1} = (D^-)_{i+1/2}^{n+1} J_{i+1/2}^{n+1} \quad \text{при } \mu \leq 0; \\ (D^+)_{i+1/2}^{n+1} &= 1 + \frac{L \left(\Delta J_{i-1/2}^{n+1}, \Delta J_{i+1/2}^{n+1} \right)}{2J_{i+1/2}^{n+1}}; \quad (D^-)_{i+1/2}^{n+1} = 1 - \frac{L \left(\Delta J_{i-1/2}^{n+1}, \Delta J_{i+1/2}^{n+1} \right)}{2J_{i+1/2}^{n+1}}. \end{aligned}$$

Возьмем коэффициенты $(D^\pm)_{i+1/2}^{n+1}$ с предыдущего шага:

$$J_{i+1}^{n+1} = (D^+)_{i+1/2}^n J_{i+1/2}^{n+1}; \quad J_i^{n+1} = (D^-)_{i+1/2}^n J_{i+1/2}^{n+1}. \quad (13)$$

В отличие от полунейвной схемы этот способ не приводит к расширению шаблона на искомом шаге и позволяет оставаться в рамках одной ячейки при бегущем счете. Схема, построенная по TVD-методологии, с соотношениями (13), связывающими величины с целыми и полуцелыми индексами через множитель D^\pm , называется мультипликативной TVDR-схемой. В работе [31] показано, что для ограничителей $\min \text{ mod}$ и Чакравати—Ошера введенные указанным образом коэффициенты D^\pm положительны и ограничены.

При $\mu > 0$ получаем

$$\begin{aligned} J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{1}{q + C (D^+)_{i+1/2}^n} J_{i+1/2}^n + \frac{C (D^+)_{i+1/2}^n}{q + C (D^+)_{i+1/2}^n} d_{i-1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1}, \quad d_{i-1/2}^n = \frac{(D^+)_{i-1/2}^n}{(D^+)_{i+1/2}^n}; \\ J_{i+1}^{n+1} &= (D^+)_{i+1/2}^n J_{i+1/2}^{n+1}. \end{aligned} \quad (14)$$

В силу положительности D^+ из уравнения (14) видно, что $J_{i+1/2}^{n+1} \geq 0$ при $J_{i+1/2}^n \geq 0$ и $J_{i-1/2}^{n+1} \geq 0$. Кроме того, положительно и значение в узле J_{i+1}^{n+1} , чего не было в полунейвной схеме. Из уравнения (14) получаем

$$0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max \left(J_{i+1/2}^n, d_{i-1/2}^n J_{i-1/2}^{n+1} \right). \quad (15)$$

Таким образом, мультипликативная TVDR-схема положительна и удовлетворяет принципу максимума с точностью до множителя $d_{i-1/2}^n$. Определим порядок малости множителя $d_{i-1/2}^n$:

$$d_{i-1/2}^n = 1 + \frac{h}{(D^+)_{i+1/2}^n} \frac{(D^+)_{i-1/2}^n - (D^+)_{i+1/2}^n}{h} \approx 1 - \frac{h^2}{2(D^+)_{i+1/2}^n} \frac{\partial^2 (\ln J_{i+1}^n)}{\partial r^2} = 1 - O(h^2).$$

Таким образом, неравенство (15) обеспечивает принцип максимума в ячейке с точностью до второго порядка малости по пространству. При $0 \leq d_{i-1/2}^n \leq 1$ принцип максимума выполняется всегда. В остальных случаях при необходимости можно в точках нарушения условия (15) полагать $(D^+)_{i-1/2}^n = (D^+)_{i+1/2}^n$, что означает модификацию в этих точках коэффициента D^+ , либо $(D^+)_{i-1/2}^n = (D^+)_{i+1/2}^n = 1$, что означает переход в этих точках на St-схему первого порядка.

Достоинствами мультипликативной TVDR-схемы являются:

- положительность при $D^\pm > 0$;
- второй порядок аппроксимации по пространству, за исключением отдельных точек;
- возможность использования экономичного бегущего счета.

К недостаткам можно отнести непринадлежность классу TVD.

Аддитивная TVDR-схема

Если в системе уравнений (6) взять единообразную функцию-ограничитель ϕ для всех μ , а с предыдущего шага брать не только ϕ , но и саму разность $\Delta J_{i-1/2}^n$, то можно записать $J_{i+1}^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} + 0,5\phi_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n$ при $\mu > 0$ и $J_i^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} - 0,5\phi_{i+1/2}^n \Delta J_{i-1/2}^n$ при $\mu \leq 0$, или с учетом того, что $\phi_{i+1/2} \Delta J_{i-1/2} = L(\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2}) = 2L_{i+1/2}$,

$$J_{i+1}^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} + L_{i+1/2}^n \text{ при } \mu > 0; \quad J_i^{n+1} = J_{i+1/2}^{n+1} - L_{i+1/2}^n \text{ при } \mu \leq 0. \quad (16)$$

Схема, построенная по TVD-методологии с соотношениями (16), связывающими величины с целыми и полуцелыми индексами через TVD-добавку $L_{i+1/2}^n$, называется аддитивной TVDR-схемой.

Подстановка (16) в (3) приводит к уравнениям

$$J_{i+1/2}^{n+1} = \frac{J_{i+1/2}^n + C J_i^{n+1} - C L_{i+1/2}^n}{q + C} \text{ при } \mu > 0; \quad J_{i+1/2}^{n+1} = \frac{J_{i+1/2}^n - C J_{i+1}^{n+1} - C L_{i+1/2}^n}{q - C} \text{ при } \mu \leq 0, \quad (17)$$

по которым можно вести рекуррентный бегущий счет. Хотя аппроксимация в этой схеме строится в рамках трех соседних ячеек по значениям величины с предыдущего временного слоя, аппроксимация на верхнем временном слое, как и в мультипликативной TVDR-схеме, рассматривается в рамках одной ячейки.

Если в системе (17) исключить значения на гранях, то получаем исключенную систему для средней величины в ячейке:

$$\begin{aligned} J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{J_{i+1/2}^n + C J_{i-1/2}^{n+1} + C (L_{i-1/2}^n - L_{i+1/2}^n)}{q + C} \text{ при } \mu > 0; \\ J_{i+1/2}^{n+1} &= \frac{J_{i+1/2}^n - C J_{i+3/2}^{n+1} - C (L_{i+1/2}^n - L_{i+3/2}^n)}{q - C} \text{ при } \mu \leq 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Из формул (18) для $L_{i-1/2}^n \geq L_{i+1/2}^n$, $\mu > 0$ следует условие положительности $J_{i+1/2}^{n+1}$ при положительности $J_{i+1/2}^n$, $J_{i-1/2}^{n+1}$, но для центральной точки не выполняется условие $0 \leq J_{i+1/2}^{n+1} \leq \max(J_{i+1/2}^n, J_{i-1/2}^{n+1})$, которое гарантирует выполнение принципа максимума и монотонность. Поэтому при $J_{i+1/2}^{n+1} < 0$ полагается $L_{i-1/2}^n = L_{i+1/2}^n$ и счет проводится по схеме повышенного порядка

с одинаковыми ограничителями. При $J_{i+1}^{n+1} < 0$ полагается $L_{i+1/2}^n = 0$ и счет проводится по схеме первого порядка аппроксимации. Аналогичные неравенства получаются при $\mu \leq 0$ (при $J_{i+1/2}^{n+1} < 0$ полагается $L_{i+3/2}^n = L_{i+1/2}^n$, при $J_i^{n+1} < 0$ полагается $L_{i+1/2}^n = 0$).

Хотя при такой реализации нельзя получить принцип максимума для всей задачи и монотонность по Годунову, в схеме выполняется условие положительности $J_{i+1/2}^{n+1}$ при $L_{i+1/2}^n \geq L_{i+3/2}^n$ во всех ячейках.

Аддитивная TVDR-схема проще мультипликативной TVDR-схемы и ближе по построению к TVD-схемам, но условия положительности $J_{i+1/2}^{n+1}$ жестче. Из $L_{i-1/2}^n \geq L_{i+1/2}^n$ при $\mu > 0$ следует $\phi_{i-1/2} \Delta J_{i-3/2} \geq \phi_{i+1/2} \Delta J_{i-1/2}$, или в другом виде, $\phi_{i+1/2} \leq \phi_{i-1/2} \theta_{i-1/2}$. Из $L_{i+1/2}^n \geq L_{i+3/2}^n$ при $\mu \leq 0$ следует $\phi_{i+3/2} \leq \phi_{i+1/2} \theta_{i+1/2}$. В точках, где условие $\phi_{i+1/2} \leq \phi_{i-1/2} \theta_{i-1/2}$ не выполняется, происходит переход на схему первого порядка.

Доказать принадлежность аддитивной TVDR-схемы классу TVD не удается из-за добавок $L_{i-1/2}^n - L_{i+1/2}^n$, $L_{i+1/2}^n - L_{i+3/2}^n$ в системе (18), которые имеют второй порядок малости. Порядок малости, например, добавки $L_{i-1/2}^n - L_{i+1/2}^n$ определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} L_{i-1/2} - L_{i+1/2} &= 0,5L (\Delta J_{i-3/2}, \Delta J_{i-1/2}) - 0,5L (\Delta J_{i-1/2}, \Delta J_{i+1/2}) \approx \\ &\approx 0,5hL \left(\frac{\partial J_{i-3/2}}{\partial r}, \frac{\partial J_{i-1/2}}{\partial r} \right) - 0,5hL \left(\frac{\partial J_{i-1/2}}{\partial r}, \frac{\partial J_{i+1/2}}{\partial r} \right) \approx \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 J}{\partial r^2} = O(h^2). \end{aligned}$$

Можно сказать, что аддитивная TVDR-схема (18) обеспечивает принцип максимума с точностью до второго порядка малости по пространству. При $h \rightarrow 0$ принцип максимума выполняется. В остальных случаях можно в точках нарушения принципа максимума полагать $L_{i-1/2}^n = L_{i+1/2}^n$ при $\mu > 0$ и $L_{i+3/2}^n = L_{i+1/2}^n$ при $\mu \leq 0$ или переходить на схему первого порядка аппроксимации, полагая $L_{i+1/2}^n = 0$.

Схемы TVDR могут применяться не только самостоятельно к решению УП, но и как вспомогательные алгоритмы. Это можно продемонстрировать на примере схемы DDAD-TVDR.

Схема DDAD-TVDR

Из теории дифференциальных приближений известно, что при численном решении уравнения переноса DS_n -методом по схемам второго порядка аппроксимации могут реализовываться немонотонности двух типов.

Немонотонности первого типа возникают в оптически плотной среде. Они вызваны наличием в ПДП антидиссипативной добавки вида $-\frac{\alpha}{12} h^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2}$. Эту антидиссипацию можно подавить путем введения искусственной добавки, имеющей второй порядок малости.

Немонотонности второго типа возникают в зоне больших градиентов из-за слагаемых с третьими производными $\mu h^2 \frac{\partial^3 J}{\partial x^3}$ в ПДП, при которых решение УП в ПДП становится решением уравнения типа Кортевега де Вриза. Решение уравнения Кортевега де Вриза в зоне разрывов носит осциллирующий характер независимо от знака коэффициента перед производной третьего порядка. Подобное поведение характерно для всех линейных разностных схем не ниже второго порядка аппроксимации. Если же переходить в таких зонах на монотонную схему первого порядка, то осцилляции будут подавляться, но вместе с тем будет снижаться точность метода. При этом, если переходить на схему первого порядка при получении отрицательного решения, то нефизические осцилляции, возникающие для положительных значений, остаются. Поэтому для монотонизации линейных разностных схем второго порядка аппроксимации следует использовать нелинейные алгоритмы, в частности, TVDR-схемы, описанные выше.

Рассмотрим подобный подход к DDAD-схеме, которая была предложена в 1998 г. для решения УП в дипломной работе И. А. Кондакова (руководитель А. А. Шестаков). В двумерном случае в DDAD-схеме для расчета в ячейках с двумя неосвещенными противоположными гранями, а также

при получении отрицательного решения использовалась St-схема. В дальнейшем этот вариант был назван DDAD/St-схемой. DDAD/St-схема применялась для решения как двумерного уравнения переноса нейтронов [43, 44], так и двумерного уравнения переноса фотонов [45]. Сравнение по точности с другими схемами приведено в работе [46].

После создания первых TVDR-схем в 2009 г. для повышения точности схемы DDAD для ячеек с двумя неосвещенными противоположными гранями было предложено использовать TVD-реконструкцию. Но в отличие от TVDR-схем, рассмотренных выше, в схеме DDAD-TVDR реконструкция TVD применяется только для вспомогательной диссипативной функции ψ , а не для основной J , как в схемах TVDR. Еще одной особенностью схемы DDAD-TVDR является TVD-реконструкция источника на гранях ячейки.

В схеме DDAD/St при появлении отрицательных интенсивностей происходит понижение порядка точности за счет перехода на монотонную St-схему первого порядка аппроксимации. В схеме DDAD-TVDR при появлении отрицательных интенсивностей переход на TVDR-схему происходит более плавно (со схемы второго порядка аппроксимации DDAD на схему повышенного порядка аппроксимации TVDR), что делает ее предпочтительнее также и по числу итераций.

Схема DDAD для уравнения (1) имеет вид

$$qJ_{i+1/2}^{n+1} + C\Delta\psi_i^{n+1} = J_{i+1/2}^n; \quad J_{i+1/2}^{n+1} = \frac{\psi_{i+1}^{n+1} + \psi_i^{n+1}}{2} + \delta \operatorname{sign}(\mu)\Delta\psi_i^{n+1} - \theta \operatorname{sign}(\mu)\Delta J_i^n, \quad (19)$$

где δ, θ, q — неотрицательные параметры схемы: $\delta = \frac{1}{2} \frac{1 + e^{-\gamma}}{1 - e^{-\gamma}} - \frac{1}{\gamma}$, $0 \leq \delta \leq 0,5$, $\gamma = \frac{qh}{c\tau|\mu|} \geq 0$;
 $\theta = \frac{\delta}{q}$, $0 \leq \theta \leq 0,5$; $q = 1 + c\tau\alpha \geq 1$; $C = \frac{c\tau\mu}{h}$.

Подставляя $J_{i+1/2}^{n+1}$ из второго уравнения системы (19) в первое, получаем уравнение для диссипативной функции ψ :

$$\frac{\psi_{i+1}^{n+1} + \psi_i^{n+1}}{2} + z\Delta\psi_i^{n+1} = \frac{1}{q}J_{i+1/2}^n + \theta \operatorname{sign}(\mu)\Delta J_i^n,$$

где $z = \delta \operatorname{sign}(\mu) + \frac{C}{q} = \frac{\mu}{2|\mu|} \frac{1 + e^{-\gamma}}{1 - e^{-\gamma}}$ с учетом, что $\operatorname{sign}(\mu) = \frac{\mu}{|\mu|}$ при $\mu \neq 0$.

Разрешив это уравнение относительно ψ для организации бегущего счета, получим

$$\begin{aligned} \psi_{i+1}^{n+1} &= e^{-\gamma}\psi_i^{n+1} + (1 - e^{-\gamma}) \left(q^{-1}J_{i+1/2}^n + \theta\Delta J_i^n \right) \quad \text{при } \mu > 0; \\ \psi_i^{n+1} &= e^{-\gamma}\psi_{i+1}^{n+1} + (1 - e^{-\gamma}) \left(q^{-1}J_{i+1/2}^n - \theta\Delta J_i^n \right) \quad \text{при } \mu \leq 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Эти формулы аналогичны точному решению дифференциального уравнения $\frac{d\psi}{dx} + \alpha\psi = Q$: $\psi = e^{-\alpha x}\psi_0 + (1 - e^{-\alpha x})Q/\alpha$ при $\alpha = \operatorname{const}$, $Q = \operatorname{const}$, $\psi_0 = \operatorname{const}$.

То есть схема DDAD дает точное решение стационарного УП в рамках ячейки при постоянных значениях γ и Q . Это свойство схема DDAD сохраняет и в нелинейных задачах, так как при аппроксимации в рамках разностной ячейки предполагается постоянство всех дискретных функций:

$$\alpha_{i+1/2} = \operatorname{const}; \quad \gamma_{i+1/2} = \operatorname{const}; \quad Q_{i+1/2}^n = J_{i+1/2}^n + \operatorname{sign}(\mu) (\theta q)_{i+1/2}^n \Delta J_i^n = \operatorname{const}.$$

Из формул (20) следует положительность диссипативной функции в узлах при $Q_{i+1/2}^n \geq 0$. Используя при линейном представлении J^n ограничение производной $\left| \frac{J_{i+1}^n - J_i^n}{h} \right| \leq \frac{2}{h} J_{i+1/2}^n$, можно в ячейках, где нарушается условие положительности диссипативной функции, производную ΔJ_i^n выбирать из условия $\Delta J_i^n = 2J_{i+1/2}^n \operatorname{sign}(\Delta J_i^n)$. В этом случае выполняется условие положительности правой части УП, которое гарантирует выполнение условия положительности ψ :

$$Q_{i+1/2}^n = [1 + 2\delta \operatorname{sign}(\mu) \operatorname{sign}(\Delta J_i^n)] J_{i+1/2}^n \geq 0 \quad \text{при } \delta = \theta q \leq 0,5.$$

После вычисления диссипативной функции в узлах можно из второго уравнения системы (19) вычислить значения интегральной средней величины в центрах ячеек. При $J_{i+1/2}^{n+1} < 0$ полагается $\theta = 0$.

Схема DDAD-TVDR при $\theta = 0$ удовлетворяет принципу максимума для диссипативной функции. Это несложно показать, так как при $\mu > 0$ получаем

$$\begin{aligned} \psi_{i+1}^{n+1} &\leq e^{-\gamma} \max\left(\psi_i^{n+1}, J_{i+1/2}^n\right) + \frac{1 - e^{-\gamma}}{q} \max\left(\psi_i^{n+1}, J_{i+1/2}^n\right) = \\ &= \frac{1 + c\tau\alpha e^{-\gamma}}{1 + c\tau\alpha} \max\left(\psi_i^{n+1}, J_{i+1/2}^n\right) \leq \max\left(\psi_i^{n+1}, J_{i+1/2}^n\right). \end{aligned}$$

При $\mu \leq 0$ аналогично получаем $\psi_i^{n+1} \leq \max\left(\psi_{i+1}^{n+1}, J_{i+1/2}^n\right)$. Отсюда следует принцип максимума для всех узлов разностной сетки: $\psi_i^{n+1} \leq \max_{n,i}\left(\psi_0^{n+1}, \psi_1^{n+1}, J_{i+1/2}^n\right)$. С учетом соотношений на границах $\psi_0^{n+1} = J_L$, $\psi_1^{n+1} = J_R$ получаем принцип максимума для всей задачи: $0 \leq \psi_i^{n+1} \leq \max(J^0, J_L, J_R)$.

Если систему (20) при $\theta = 0$ записать через разности значений ψ в двух соседних ячейках

$$\begin{aligned} \Delta\psi_{i+1}^{n+1} &= e^{-\gamma} \Delta\psi_i^{n+1} + \frac{1 - e^{-\gamma}}{q} \Delta J_{i+1/2}^n \quad \text{при } \mu > 0; \\ \Delta\psi_i^{n+1} &= e^{-\gamma} \Delta\psi_{i+1}^{n+1} + \frac{1 - e^{-\gamma}}{q} \Delta J_{i+1/2}^n \quad \text{при } \mu \leq 0, \end{aligned}$$

то можно показать монотонность диссипативной функции.

Аналогично, если второе уравнение системы (19) при $\theta = 0$ записать через разности значений ψ в двух соседних ячейках

$$\Delta J_{i+1/2}^{n+1} = (0,5 + \delta \operatorname{sign}(\mu)) \Delta\psi_{i+1}^{n+1} + (0,5 - \delta \operatorname{sign}(\mu)) \Delta\psi_i^{n+1},$$

то с учетом того, что $0,5 \pm \delta \geq 0$, можно показать монотонность интегральной средней величины.

Достоинствами схемы DDAD-TVDR являются:

- положительность с переходом при $J_{i+1/2}^{n+1} < 0$ на $\theta = 0$;
- безусловная монотонность при $\theta = 0$;
- второй порядок аппроксимации по пространству, за исключением отдельных точек;
- возможность использования экономичного бегущего счета.

Численные расчеты

Для численных расчетов рассмотрим вторую задачу Флека [47]. Эта задача является наиболее популярным тестом для задач СУПТИ. В ней исследуется прохождение тепловой волны через различные по оптической толщине среды, на границе которых температура вещества терпит разрывы первого и второго рода. В данной задаче слоистая система толщиной 4 см и плотностью 1 г/см^3 прогревается стационарным планковским источником излучения, соответствующим температуре 1 кэВ. Уравнение состояния — $E = 0,81T$, рассеяние отсутствует.

Для численного моделирования по радиусу взята неравномерная сетка со сгущением к границам веществ в 59 ячеек. Многогрупповой коэффициент поглощения берется в виде

$$\alpha_{cg} = \begin{cases} 10\,000 \varepsilon_g^{-3} (1 - e^{-\varepsilon_g/T}), & 102 \leq R \leq 102,4; \\ 27 \varepsilon_g^{-3} (1 - e^{-\varepsilon_g/T}) & \text{в остальной области.} \end{cases}$$

По энергии фотонов бралось 15 групп (g — индекс группы): $\varepsilon_g = 0,15; 0,45; 0,7; 1; 1,35; 1,65; 2,1; 2,55; 2,85; 3,5; 4,5; 6; 8; 10; 13$. Задача считалась с постоянным шагом 2×10^{-5} мс до выхода на стационарный режим при $t = 0,01$ мс.

На рис. 1, 2 приведены графики распределений температуры вещества при $t = 0,01$ мс и $t = 0,0005$ мс, полученные по схемам St, DDAD-TVDR, мультипликативной TVDR и аддитивной

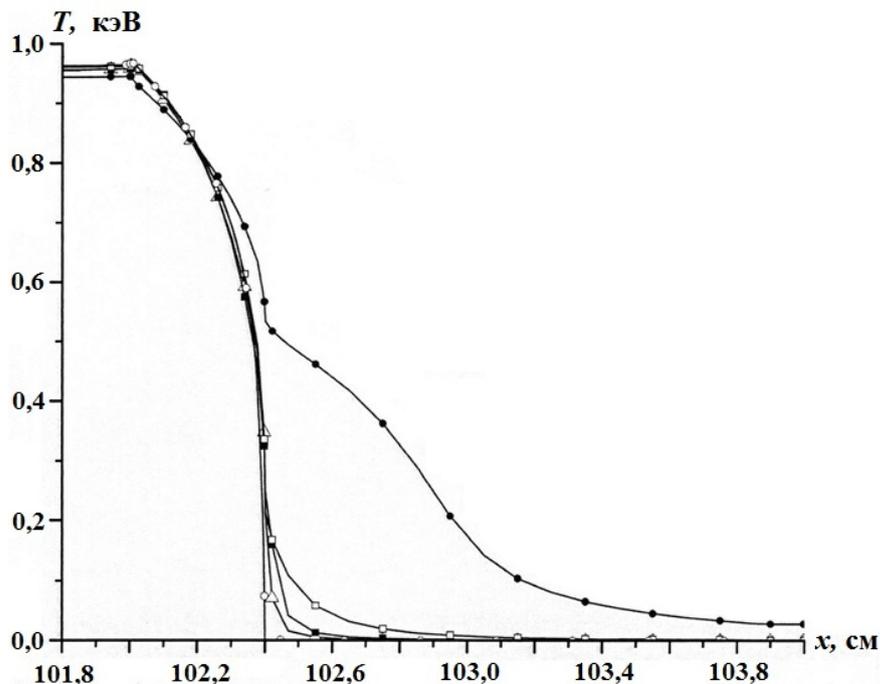


Рис. 1. Профили температуры вещества при $t = 0,0005$ мс: \triangle — DDAD-TVDR-схема; \blacksquare — мультипликативная TVDR-схема; \square — аддитивная TVDR-схема; \bullet — St-схема; \circ — эталонное решение

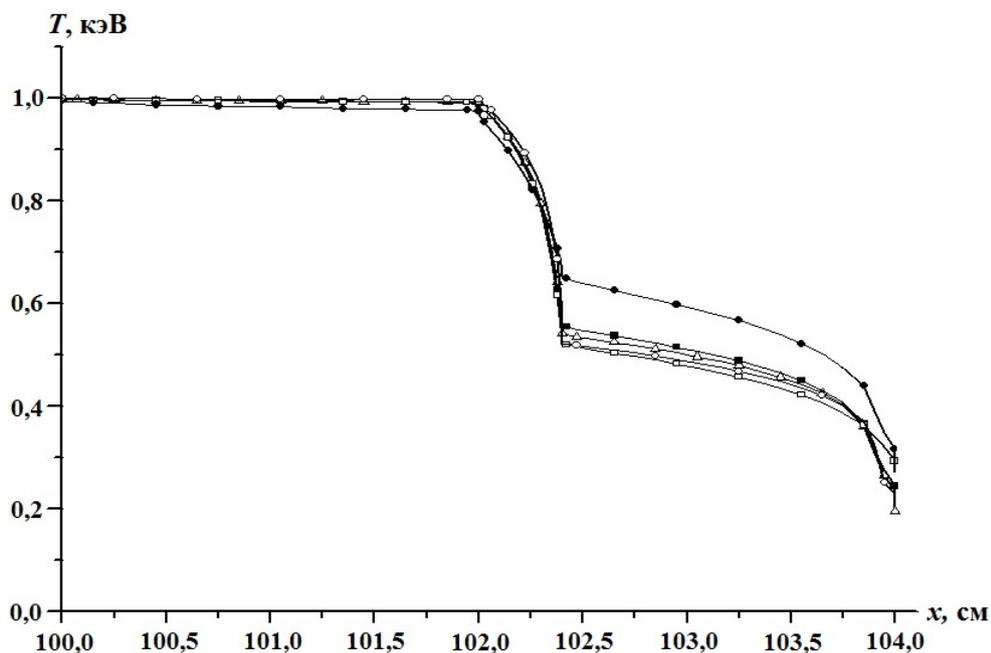


Рис. 2. Профили температуры вещества при $t = 0,01$ мс: \triangle — DDAD-TVDR-схема; \blacksquare — мультипликативная TVDR-схема; \square — аддитивная TVDR-схема; \bullet — St-схема; \circ — аналитическое решение

TVDR. Для сравнения на рис. 1 приведено эталонное решение, полученное в расчетах на сходимость на разностной сетке, а на рис. 2 — распределение температуры, полученное по аналитическим формулам [48].

Из рисунков видно, что все схемы повышенного порядка аппроксимации дают монотонные температуры, близкие к аналитическому решению, кроме St-схемы, профиль которой из-за первого порядка аппроксимации заметно отличается от точного, особенно на интервале $102,4 \text{ см} < x < 104 \text{ см}$. При измельчении сетки в расчетах на сходимость все схемы дают одинаковый результат.

Заключение

Для решения СУПТИ предлагается новый класс TVDR-схем. TVDR-схемами называются неявные разностные схемы, использующие для нахождения основных величин двухточечный сеточный шаблон на искомом временном шаге и более широкий шаблон для TVD-реконструкции основных величин и их производных с предыдущего шага. Это позволяет при решении СУПТИ пользоваться экономичными численными методами, в которых число арифметических операций пропорционально количеству узлов разностной сетки. Для рассмотренных схем доказано, что разностная дискретизация абсолютно устойчива и консервативна. Получены условия положительности и монотонности схем.

Список литературы

1. *Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПМ, 1986.
Bass L. P., Voloshchenko A. M., Germogenova T. A. Metody diskretnykh ordinat v zadachakh o perenose izlucheniya. M.: IPM, 1986.
2. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
Zeldovich Ya. B., Rayzer Yu. P. Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodynamiceskikh yavleniy. M.: Nauka, 1966.
3. *Елесин В. А., Трощев В. Е., Юдинцев В. Ф.* Развитие численных методов и программ расчета одномерных спектральных задач переноса теплового излучения во ВНИИЭФ (задачи ФО) // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 1. С. 11–28.
Elesin V. A., Troshchiev V. E., Yudinsev V. F. Razvitie chislennykh metodov i programm rascheta odnomernykh spektralnykh zadach perenosa teplovogo izlucheniya vo VNIIEF (zadachi FO) // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2002. Vyp. 1. S. 11–28.
4. *Грошев Е. В., Пастушенко А. М., Юдинцев В. Ф.* Об одной трехточечной разностной схеме с весовым множителем для уравнения переноса // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1985. Вып. 2. С. 87–96.
Groshev E. V., Pastushenko A. M., Yudinsev V. F. Ob odnoy trekhtochechnoy raznostnoy skheme s vesovym mnozhitелеm dlya uravneniya perenosa // Tam zhe. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1985. Vyp. 2. S. 87–96.
5. *Алексеев А. В., Беляков И. М., Бочков А. И., Евдокимов В. В., Ириничев Е. А., Морозов В. Ю., Москвин А. Н., Нурждин А. А., Пепеляев М. П., Резчиков В. Ю., Сучкова В. В., Шарифуллин Э. Ш., Шемякина Т. В., Шумилин В. А.* Методика САТУРН-2005. Математические модели, алгоритмы и программы решения многомерных задач переноса частиц и энергии // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 4. С. 17–30.
Alekseev A. V., Belyakov I. M., Bochkov A. I., Evdokimov V. V., Irinichev E. A., Morozov V. Yu., Moskvina A. N., Nuzhdin A. A., Pepelyaev M. P., Rezchikov V. Yu., Suchkova V. V., Sharifullin E. Sh., Shemyakina T. V., Shumilin V. A. Metodika SATURN-2005. Matematicheskie modeli i

- programmy resheniya mnogomernykh zadach perenosa chastits i energii // Tam zhe. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2013. Vyp. 4. S. 17–30.
6. *Гусев В. Ю., Козманов М. Ю., Рачилов Е. Б.* Метод решения неявных разностных уравнений, аппроксимирующих системы уравнений переноса и диффузии излучения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1984. Т. 24, № 12. С. 1842–1849.
Gusev V. Yu., Kozmanov M. Yu., Rachilov E. B. Metod resheniya neyavnykh raznostnykh uravneniy, approssimiruyushchikh sistemy uravneniy perenosa i diffuzii izlucheniya // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1984. T. 24, N 12. S. 1842–1849.
 7. *Шестаков А. А.* Об одном варианте метода выделения диагонального элемента // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1990. Вып. 2. С. 71–75.
Shestakov A. A. Ob odnom variante metoda vydeleniya diagonalnogo elementa // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1990. Vyp. 2. S. 71–75.
 8. *Годунов С. К.* Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Математический сборник. 1959. Т. 47. С. 271–306.
Godunov S. K. Raznostny metod chislennogo rascheta razryvnykh resheniy uravneniy gidrodinamiki // Matematicheskii sbornik. 1959. T. 47. S. 271–306.
 9. *Шокин Ю. И.* Метод дифференциального приближения. Новосибирск: Наука, 1974.
Shokin Yu. I. Metod differentsialnogo priblizheniya. Novosibirsk: Nauka, 1974.
 10. *Карпман В. И.* Нелинейные волны в диспергирующих средах. М.: Наука, 1973.
Karptan V. I. Nelineinye volny v dispergiruyushchikh sredakh. M.: Nauka, 1973.
 11. *Шестаков А. А.* Основные нерешенные проблемы при численном решении уравнения переноса излучения // Тез. докл. X Межд. конф. "Забабахинские науч. чтения". Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2010.
Shestakov A. A. Osnovnye nereshennye problemy pri chislennom reshenii uravneniya perenosa izlucheniya // Tez. dokl. X Mezhd. konf. "Zababakhinskie nauch. chteniya". Snezhinsk: RFYaTs-VNIITF, 2010.
 12. *Михайловская М. Н., Рогов В. В.* Монотонные компактные схемы бегущего счета для систем уравнений гиперболического типа // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2012. Т. 52, № 4. С. 672–695.
Mikhaylovskaya M. N., Rogov V. V. Monotonnye kompaktnye skhemy begushchego scheta dlya sistem uravneniy giperbolicheskogo tipa // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2012. T. 52, N 4. S. 672–695.
 13. *Белоцерковский О. М., Гушчин В. А., Коншин В. Н.* Метод расщепления для исследования течений стратифицированной жидкости со свободной поверхностью // Там же. 1987. Т. 27, № 4. С. 594–609.
Belotserkovskiy O. M., Gushchin V. A., Konshin V. N. Metod rasshchepleniya dlya issledovaniya techeniy stratifitsirovannoy zhidkosti so svobodnoy poverkhnostyu // Tam zhe. 1987. T. 27, N 4. S. 594–609.
 14. *Михайловская М. Н., Рогов В. В.* Монотонная высокоточная компактная схема бегущего счета для квазилинейных уравнений гиперболического типа // Докл. АН. 2011. Т. 440, № 2. С. 172–177.
Mikhaylovskaya M. N., Rogov V. V. Monotonnaya vysokotochnaya kompaktnaya skhema begushchego scheta dlya kvasilineynykh uravneniy giperbolicheskogo tipa // Dokl. AN. 2011. T. 440, N 2. S. 172–177.
 15. *Пинчуков В. И.* О построении монотонных схем типа предиктор-корректор произвольного порядка аппроксимации // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 9. С. 95–103.
Pinchukov V. I. O postroenii monotonnykh skhem tipa prediktor-korrektor proizvolnogo poryadka approssimatsii // Matematicheskoye modelirovanie. 1991. T. 3, N 9. S. 95–103.

16. *Козманов М. Ю.* Монотонные схемы для системы переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1989. Вып. 2. С. 51–54.
Kozmanov M. Yu. Monotonnyye skhemy dlya sistemy perenosa izlucheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1989. Vyp. 2. S. 51–54.
17. *Гусев В. Ю., Козманов М. Ю.* Схема первого порядка точности с апостериорной коррекцией для решения системы нестационарных уравнений переноса излучения и энергии // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1988. Вып. 3. С. 56–63.
Gusev V. Yu., Kozmanov M. Yu. Skhema pervogo poryadka tochnosti s aposteriornoy korrektsiey dlya resheniya sistemy nestatsionarnykh uravneniy perenosa izlucheniya i energii // Tam zhe. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1988. Vyp. 3. S. 56–63.
18. *Андреев Е. С., Гусев В. Ю., Козманов М. Ю.* Методы повышения точности схемы первого порядка аппроксимации для решения уравнений переноса излучения // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1998. Вып. 1. С. 15–18.
Andreev E. S., Gusev V. Yu., Kozmanov M. Yu. Metody povysheniya tochnosti skhemy pervogo poryadka approksimatsii dlya resheniya uravneniy perenosa izlucheniya // Tam zhe. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1998. Vyp. 1. S. 15–18.
19. *Карлсон Б.* Численное решение задачи кинетической теории нейтронов // Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1963. С. 243–258.
Karlson B. Chislennoe reshenie zadachi kineticheskoy teorii neytronov // Teoriya yadernykh reaktov. M.: Atomizdat, 1963. S. 243–258.
20. *Федоренко Р. П.* Применение разностных схем высокой точности для численного решения гиперболических уравнений // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1962. Т. 2, № 6. С. 1122–1128.
Fedorenko R. P. Primenenie raznostnykh skhem vysokoy tochnosti dlya chislennogo resheniya giperbolicheskikh uravneniy // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1962. T. 2, N 6. S. 1122–1128.
21. *Rhoades W. A., Engle W. W.* A new weighted-difference formulation for discrete ordinates calculations // Trans. Am. Nucl. Soc. 1977. Vol. 27. P. 776–777.
22. *Гаджиев А. Д., Кондаков И. А., Писарев В. Н., Стародумов О. И., Шестаков А. А.* Метод дискретных ординат с искусственной диссипацией (DDAD-схема) для численного решения уравнения переноса нейтронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 4. С. 13–24.
Gadzhiev A. D., Kondakov I. A., Pisarev V. N., Starodumov O. I., Shestakov A. A. Metod diskretnykh ordinat s iskusstvennoy dissipatsiey (DDAD-skhema) dlya chislennogo resheniya uravneniya perenosa neytronov // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2003. Vyp. 4. S. 13–24.
23. *Шестаков А. А.* Численные эффекты при моделировании переноса теплового излучения // Там же. 2018. Вып. 4. С. 29–45.
Shestakov A. A. Chislennyye efekty pri modelirovanii perenosa teplovogo izlucheniya // Tam zhe. 2018. Vyp. 4. S. 29–45.
24. *Шестаков А. А.* Сеточные эффекты при моделировании переноса теплового излучения // Там же. 2019. Вып. 1. С. 44–56.
Shestakov A. A. Setochnyye efekty pri modelirovanii perenosa teplovogo izlucheniya // Tam zhe. 2019. Vyp. 1. S. 44–56.
25. *Шестаков А. А.* О диффузионных свойствах схемы РОМБ для P_1 -уравнений // Там же. 2011. Вып. 2. С. 56–62.
Shestakov A. A. O diffuzionnykh svoystvakh skhemy ROMB dlya P_1 -uravneniy // Tam zhe. 2011. Vyp. 2. S. 56–62.

26. *Гаджиев А. Д., Писарев В. Н., Шестаков А. А.* Метод расчета двумерных задач теплопроводности на неортогональных сетках // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1982. Т. 22, № 2. С. 339–347.
Gadzhiev A. D., Pisarev V. N., Shestakov A. A. Metod rascheta dvumernykh zadach teploprovodnosti na neortogonalnykh setkakh // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1982. T. 22, N 2. S. 339–347.
27. *Гаджиев А. Д., Шестаков А. А.* Метод "Ромб" для решения многогруппового уравнения переноса излучения в P_1 -приближении // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1989. Вып. 3. С. 66–70.
Gadzhiev A. D., Shestakov A. A. Metod "Romb" dlya resheniya mnogogruppovogo uravneniya perenosa izlucheniya v P_1 -priblizhenii // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1989. Vyp. 3. S. 66–70.
28. *Гаджиев А. Д., Селезнёв В. Н., Шестаков А. А.* DS_n -метод с искусственной диссипацией и ВДМ-метод ускорения итераций для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в кинетической модели // Там же. 2003. Вып. 4. С. 33–46.
Gadzhiev A. D., Seleznev V. N., Shestakov A. A. DS_n -metod s iskusstvennoy dissipatsiyey i VDM-metod uskoreniya iteratsiy dlya chislenного resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v kineticheskoy modeli // Tam zhe. 2003. Vyp. 4. S. 33–46.
29. *Калиткин Н. Н., Корякин П. В.* Бикомпактные схемы и слоистые среды // Докл. АН. 2008. Т. 419, № 6. С. 744–748.
Kalitkin N. N., Koryakin P. V. Bikompaktnye skhemy i sloistye sredy // Dokl. AN. 2008. T. 419, N 6. S. 744–748.
30. *Колган В. П.* Применение принципа минимальных значений производных к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Уч. Зап. ЦАГИ. 1972. Т. 3, № 6. С. 68–77.
Kolgan V. P. Primenenie printsipa minimalnykh znacheniy proizvodnykh k postroyeniyu konechno-raznostnykh skhem dlya rascheta razryvnykh resheniy gazovoy dinamiki // Uch. Zap. TsAGI. 1972. T. 3, N 6. S. 68–77.
31. *Harten A.* High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comp. Phys. 1983. Vol. 49. P. 357–393.
32. *Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Шестаков А. А.* Применение TVD-подхода к DS_n -методу решения уравнения переноса теплового излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 37–48.
Gadzhiev A. D., Zavyalov V. V., Shestakov A. A. Primenenie TVD-podkhoda k DS_n -metodu resheniya uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2009. Vyp. 2. S. 37–48.
33. *Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Шестаков А. А.* Применение TVD-подхода к DS_n -методу решения уравнения переноса теплового излучения в осесимметричной RZ -геометрии // Там же. 2010. Вып. 2. С. 30–39.
Gadzhiev A. D., Zavyalov V. V., Shestakov A. A. Primenenie TVD-podkhoda k DS_n -metodu resheniya uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v osesimmetrichnoy RZ -geometrii // Tam zhe. 2010. Vyp. 2. S. 30–39.
34. *Шестаков А. А.* К вопросу построения монотонной разностной аппроксимации системы P_1 -уравнений // Там же. 2017. Вып. 1. С. 30–45.
Shestakov A. A. K voprosu postroyeniya monotonnoy raznostnoy approksimatsii sistemy P_1 -uravneniy // Tam zhe. 2017. Vyp. 1. S. 30–45.
35. *Гаджиев А. Д., Кошутин Д. А., Шестаков А. А.* Метод дискретных ординат с TVD-реконструкцией и синтетический метод ускорения итераций для численного решения уравнения переноса теплового излучения // Там же. 2013. Вып. 3. С. 3–15.
Gadzhiev A. D., Koshutin D. A., Shestakov A. A. Metod diskretnykh ordinat s TVD-rekonstruktsiyey

- i sinteticheskiy metod uskoreniya iteratsiy dlya chislennogo resheniya uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya // Там же. 2013. Вып. 3. С. 3–15.
36. *Гаджиев А. Д., Кошутин Д. А., Шестаков А. А.* DS_n -метод с TVD-реконструкцией и синтетическим P_1SA -методом ускорения итераций для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в осесимметричной RZ -геометрии // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2016. Вып. 4. С. 3–19.
Gadzhiev A. D., Koshutin D. A., Shestakov A. A. DS_n -metod s TVD-rekonstruktsiyey i sinteticheskim P_1SA -metodom uskoreniya iteratsiy dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v osesimmetrichnoy RZ -geometrii // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2016. Вып. 4. С. 3–19.
37. *Гаджиев А. Д., Вершинская А. С., Грабовенская С. А., Шестаков А. А.* Применение TVD-подхода к решению уравнения переноса теплового излучения в P_1 -приближении // Там же. 2009. Вып. 2. С. 21–36.
Gadzhiev A. D., Vershinskaya A. S., Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A. Primenenie TVD-podkhoda k resheniyu uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v P_1 -priblizhenii // Там же. 2009. Вып. 2. С. 21–36.
38. *Вершинская А. С., Шестаков А. А.* Исследование порядка численной сходимости TVD-схемы для решения уравнения переноса теплового излучения в P_1 -приближении // Там же. 2013. Вып. 1. С. 18–33.
Vershinskaya A. S., Shestakov A. A. Issledovanie poryadka chislennoy skhodimosti TVD-skhemoy dlya resheniya uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v P_1 -priblizhenii // Там же. 2013. Вып. 1. С. 18–33.
39. *Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Грабовенская С. А., Шестаков А. А.* Применение TVD-подхода к решению уравнения переноса теплового излучения квазидиффузионным методом // Там же. 2010. Вып. 3. С. 3–14.
Gadzhiev A. D., Zavyalov V. V., Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A. Primenenie TVD-podkhoda k resheniyu uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya kvasidiffuzionnym metodom // Там же. 2010. Вып. 3. С. 3–14.
40. *Гаджиев А. Д., Кошутин Д. А., Шестаков А. А.* TVD-схема для численного решения переноса излучения в P_1 -приближении // Там же. 2013. Вып. 2. С. 48–55.
Gadzhiev A. D., Koshutin D. A., Shestakov A. A. TVD-skhem dlya chislennogo resheniya perenosa izlucheniya v P_1 -priblizhenii // Там же. 2013. Вып. 2. С. 48–55.
41. *Гаджиев А. Д., Чубарешко И. С., Шестаков А. А.* Неявный конечно-объемный TVD-метод для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в P_1 -приближении // Там же. 2017. Вып. 2. С. 18–29.
Gadzhiev A. D., Chubareshko I. S., Shestakov A. A. Neyavny konechno-ob'yomny TVD-metod dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v P_1 -priblizhenii // Там же. 2017. Вып. 2. С. 18–29.
42. *Шестаков А. А.* О монотонной аппроксимации системы P_1 -уравнений // Тез. докл. XIII Межд. конф. "Забабакхинские науч. чтения". Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2017. С. 358.
Shestakov A. A. O monotonnoy approksimatsii sistemy P_1 -uravneniy // Tez. dokl. XIII Mezhd. konf. "Zababakhinskie nauch. chteniya". Snezhinsk: RFYaTs-VNIITF, 2017. С. 358.
43. *Гаджиев А. Д., Кондаков И. А., Селезнев В. Н., Стародумов О. И., Шестаков А. А.* DDAD-схема для численного решения уравнения переноса // Тез. докл. VII Межд. конф. "Забабакхинские науч. чтения". Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2003. С. 209.
Gadzhiev A. D., Kondakov I. A., Seleznev V. N., Starodumov O. I., Shestakov A. A. DDAD-skhem dlya chislennogo resheniya uravneniya perenosa // Tez. dokl. VII Mezhd. konf. "Zababakhinskie nauch. chteniya". Snezhinsk: RFYaTs-VNIITF, 2003. С. 209.
44. *Гаджиев А. Д., Кондаков И. А., Писарев В. Н., Стародумов О. И., Шестаков А. А.* Метод дискретных ординат с искусственной диссипацией (DDAD-схема) для численного решения

- уравнения переноса нейтронов // Тез. докл. Межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003. С. 43.
- Gadzhiev A. D., Kondakov I. A., Pisarev V. N., Starodumov O. I., Shestakov A. A.* Metod diskretnykh ordinat s iskusstvennoy dissipatsiyey (DDAD-skhema) dlya chislennogo resheniya uravneniya perenosa neytronov // Тез. докл. Межд. семинара "Supervychisleniya i matematicheskoe modelirovanie". Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2003. S. 43.
45. *Гаджиев А. Д., Селезнёв В. Н., Шестаков А. А.* DS_n -метод с искусственной диссипацией и ВДМ-метод ускорения итераций для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в кинетической модели // Там же. С. 42.
- Gadzhiev A. D., Seleznev V. N., Shestakov A. A.* DS_n -metod s iskusstvennoy dissipatsiyey i VDM-metod uskoreniya iteratsiy dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v kineticheskoy modeli // Там же. S. 42.
46. *Завьялов В. В., Козманов М. Ю., Селезнёв В. Н., Черняков В. Е., Шестаков А. А.* Результаты численных расчетов одномерных тестовых задач переноса излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 3. С. 26–36.
- Zavyalov V. V., Kozmanov M. Yu., Seleznev V. N., Chernyakov V. E., Shestakov A. A.* Rezultaty chislennykh raschetov odnomernykh testovykh zadach perenosa izlucheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2005. Vyp. 3. S. 26–36.
47. *Fleck J. F., Cummings Jr. and J. D.* An implicit Monte-Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 8(3). С. 313–342.
48. *Завьялов В. В., Шестаков А. А.* Упрощенные решения задач Флека // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 1. С. 45–52.
- Zavyalov V. V., Shestakov A. A.* Uproshchennyye resheniya zadach Fleka // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2013. Vyp. 1. S. 45–52.

Статья поступила в редакцию 07.05.18.

TVDR-SCHEMES TO SOLVE A SYSTEM OF RADIATIVE HEAT TRANSFER EQUATIONS / A. A. Shestakov (FSUE "Acad. E. I. Zababakhin RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region).

Studies on the construction of implicit unconditionally monotone difference schemes of a higher order of approximation for the radiative heat transfer equation within the one-cell template were carried out.

Keywords: radiative transfer equation, difference schemes.

УДК 519.6

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В МЕТОДИКЕ "ЛЭГАК" ИЗМЕНЕНИЯ УДАРНО-ВОЛНОВОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ВВ ТИПА ТАТБ ПРИ МНОГОКРАТНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ УДАРНЫХ ВОЛН

Н. А. Володина, В. Б. Титова, М. О. Ширшова
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлены результаты работы по развитию кинетической модели детонации МК в методике ЛЭГАК для универсального учета зависимости ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ от его состояния перед фронтом инициирующей ударной волны. Изменения в модели коснулись формулы, "отвечающей" за плотность рождения горячих очагов разложения ВВ вблизи фронта ударной волны, а также алгоритма выделения фронта ударной волны и анализа состояния вещества перед этим фронтом. Реализованная модификация модели кинетики МК протестирована на экспериментальных данных для ВВ на основе ТАТБ при начальных плотностях $1,3 \text{ г/см}^3 \leq \rho_0 \leq 1,91 \text{ г/см}^3$.

Предложенный алгоритм позволяет автоматически учитывать состояние ВВ перед фронтом ударной волны и единым образом описывать экспериментальные данные как по сенсбилизации, так и по десенсбилизации ВВ при многократных ударно-волновых воздействиях.

Ключевые слова: кинетика детонации, ударно-волновая чувствительность, ТАТБ.

Введение

Известно, что процесс инициирования детонации в ВВ на основе ТАТБ существенным образом зависит от начальной плотности, которая определяется как степень запрессовки, так и технологией изготовления ВВ [1]. При уменьшении плотности ВВ увеличивается его ударно-волновая чувствительность (свойство *сенсбилизации*), и наоборот, при увеличении плотности ВВ уменьшается его ударно-волновая чувствительность, вплоть до отказа (свойство *десенсбилизации*). Особо сильная зависимость ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ от начальной плотности наблюдается при $\rho_0 > 1,88 \text{ г/см}^3$. Поэтому учет влияния начальной плотности является необходимым требованием к современным моделям кинетики детонации при численном моделировании ударно-волновой чувствительности ВВ, и оно было выполнено при создании модели МК [2–4].

Отметим, что если эффект десенсбилизации учитывается и в других моделях, то алгоритм сенсбилизации в волне разгрузки впервые разработан и нашел применение в модели МК.

Данная работа посвящена совершенствованию кинетической модели детонации МК в методике ЛЭГАК [5, 6] для учета зависимости ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ от его состояния перед фронтом ударной волны (УВ). Изменения в модели коснулись формулы, "отвечающей" за плотность рождения горячих очагов разложения ВВ вблизи фронта УВ, а также алгоритма выделения фронта УВ и анализа состояния вещества перед этим фронтом при последующих нагружениях.

Предложенный алгоритм позволяет автоматически учитывать состояние ВВ перед фронтом УВ и единым образом описывать экспериментальные данные как по сенсбилизации, так и по десенсбилизации.

Описание алгоритма учета сенсбилизации ВВ типа ТАТБ после предварительной разгрузки

Подробное описание модели кинетики МК и ее реализации в методике ЛЭГАК приведено в работах [3, 4]. Остановимся лишь на тех особенностях модели кинетики, которые необходимы при проведении исследований в данной работе.

Кинетическая модель детонации МК является двухстадийной. Уравнение для скорости реакции можно записать в следующем виде:

$$\frac{d\varphi}{dt} = f(\varphi, P, \rho) = \underbrace{\Phi_0(\varphi, P, \rho)}_{1\text{-я стадия}} + \underbrace{\Phi_1(\varphi, P) + \Phi_2(\varphi, P) + \Phi_3(\varphi, P)}_{2\text{-я стадия}}, \quad (1)$$

где φ — массовая концентрация продуктов взрыва, или выгорание. Первая стадия — формирование начального выгорания на инициирующей УВ. Эта стадия моделирует рождение очагов на фронте УВ, где скорость сжатия и деформация вещества максимальны. Значение выгорания на момент окончания первой стадии запоминается и является начальной степенью разложения ВВ для второй стадии. Вторая стадия включает в себя рост горячих пятен, их взаимодействие и слияние.

Из структуры уравнения для скорости реакции (1) видно, что кинетика МК предполагает выделение фронта первой УВ. В методике ЛЭГАК (как и в ряде других счетных методик) нет явного выделения УВ. Используется сквозной счет УВ, т. е. "размазывание" фронта УВ счетной вязкостью. Для выделения фронта УВ в методике ЛЭГАК для каждой ячейки заводится признак r_{ij} ; в начальный момент $r_{ij} = 0$, что соответствует невозмущенной среде. Затем в каждой ячейке, по которой идет УВ, исследуется величина $gp = \frac{q}{P+q}$, где P — давление в ячейке, а q — квадратичная счетная вязкость. Если $gp > \varepsilon_1$, то считается, что по ячейке идет первая УВ и устанавливается $r_{ij} = 1$ (рис. 1). Как только впервые выполняется условие $gp \leq \varepsilon_1$, считается, что волна прошла ячейку и ставится признак $r_{ij} = 2$. Константа $\varepsilon_1 = 0,001$ была подобрана опытным путем и хорошо себя зарекомендовала в дальнейших расчетах.

Таким образом, если для ячейки $r_{ij} = 1$ (первая УВ), то расчет выгорания ВВ идет по первому слагаемому в формуле (1). Как только первая УВ проходит ячейку, т. е. появляется признак $r_{ij} = 2$, то значение Φ_0 , полученное на этом этапе, запоминается и используется для вычисления выгорания за фронтом. Дальше расчет скорости выгорания ВВ ведется только по слагаемым $\Phi_1(\varphi, P)$, $\Phi_2(\varphi, P)$, $\Phi_3(\varphi, P)$, и возврата к формуле для первой волны уже не происходит.

Если нагружение однократное, то плотность и давление, определяющие начальное состояние ВВ, заданы и выступают в качестве параметров при вычислении выгорания на фронте УВ. При описании многократного нагружения состояние ВВ перед фронтом последующих УВ изменяется, поэтому были введены массивы для хранения фоновых значений плотности и давления ρ_{fon} и P_{fon} . Эти величины представляют собой плотности и давления в ячейке, когда $r_{ij} = 0$ или $r_{ij} = 2$. Когда в ячейке находится фронт УВ ($r_{ij} = 1$), значения величин ρ_{fon} и P_{fon} используются в качестве ρ_0 и P_0 при вычислении выгорания на фронте УВ. Таким образом, происходит автоматический учет состояния ВВ перед фронтом УВ.

За учет зависимости чувствительности ВВ типа ТАТБ от его состояния перед фронтом отвечает первое слагаемое в формуле, определяющее плотность рождения горячих очагов и выгорание на фронте УВ, которое описывается следующим дифференциальным уравнением:

$$\frac{d\varphi}{dt} = A_0 e^{-b(V_0 - V)} (P - P_k) \frac{dV}{dt}, \quad (2)$$

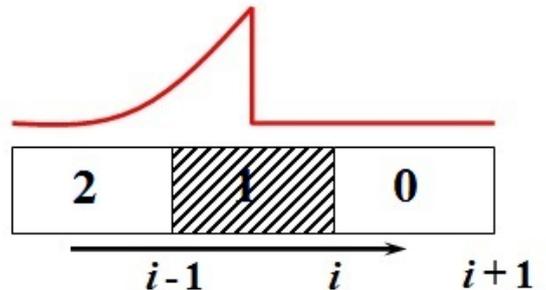


Рис. 1. Выделение фронта УВ

где A_0 , b — параметры кинетики МК; V_0 — начальный удельный объем; P_k — пороговое давление, ниже которого инициирование не происходит.

При численной реализации модели кинетики МК для вычисления выгорания вблизи фронта УВ предложено использовать не дифференциальное уравнение (2) для нахождения выгорания ВВ на фронте УВ, а проинтегрированное выражение вдоль прямой Михельсона $\left| \frac{dP}{dV} \right| = \rho_0^2 D^2$, где D — скорость распространения стационарной детонации. В этом случае выгорание на фронте УВ вычисляется следующим образом:

$$\Phi_0 = \frac{A_0 e^{-b(V_{1,93} - V_{кр})}}{b^2} \frac{P - P_0}{V_0 - V} \left\{ 1 - e^{-b(V_{кр} - V)} \left[1 + b(V_{кр} - V) \right] \right\}, \quad (3)$$

где $V_{1,93} = 1/1,93$ — теоретически максимально достижимый удельный объем ВВ типа ТАТБ, который соответствует плотности $1,93 \text{ г/см}^3$; P_0 — начальное давление; $V_{кр} = V_0 - \frac{dV}{dP} (P_k - P_0)$ — удельный объем, соответствующий пороговому давлению P_k . Выгорание на фронте УВ в кинетике МК регулируется параметрами b и A_0 . В методике ЛЭГАК для ВВ типа ТАТБ эти параметры имеют следующие значения: $b = 95$; $A_0 = 14$.

На второй стадии происходит рост горячих пятен, их взаимодействие и слияние. Параметры кинетики МК, отвечающие за выгорание ВВ за фронтом УВ для состава ВВ типа ТАТБ, приведены в работе [4].

В формуле (3) член $A_0 e^{-b(V_{1,93} - V_{кр})}$ тождественно преобразуется к следующему виду:

$$A_0 e^{-b(V_{1,93} - V_{кр})} = A_0 e^{-b(V_0 - V_{кр})} e^{-b(V_{1,93} - V_{1,91})} e^{-b(V_{1,91} - V_0)}.$$

Удобно считать в качестве номинальной начальную плотность $\rho_{0н} = \rho_{1,91} = 1,91 \text{ г/см}^3$, по отношению к которой определяется изменение ударно-волновой чувствительности в [7], тогда ρ_0 — фактическая начальная плотность ВВ на основе ТАТБ в интересующем диапазоне плотностей. При этом функциональный вид формулы (3) кинетики МК не изменяется. Первый множитель определяет выгорание за счет ударного сжатия ВВ относительно фактической начальной плотности, второй множитель является константой, а третий отвечает за изменение чувствительности ВВ при изменении его плотности относительно нормальной.

После довольно большой расчетно-теоретической работы авторами модели кинетики МК было предложено заменить член $e^{-b(V_{1,91} - V_0)}$ на $e^{-kb(V_{1,91} - V_0)}$, где зависимость k от пористости α имеет вид

$$k = \frac{k_1}{k_2 + \alpha}, \quad \alpha = \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_{1,91}} \right) \cdot 100 \%$$

Окончательно формула для вычисления выгорания на фронте УВ принимает вид

$$\Phi_0 = \frac{A_0 e^{-b(V_{1,93} - V_{1,91})} \rho_0^2 D^2 e^{-kb(V_{1,91} - V_0)}}{b^2} e^{-b(V_0 - V_{кр})} \left\{ 1 - e^{-b(V_{кр} - V)} \left[1 + b(V_{кр} - V) \right] \right\}.$$

Параметры k_1 и k_2 подбирались так, чтобы описать всю совокупность имеющихся экспериментальных данных.

Верификация алгоритма учета зависимости чувствительности ВВ типа ТАТБ от начальной плотности

В настоящий момент в РФЯЦ-ВНИИЭФ имеются следующие экспериментальные данные для ВВ на основе ТАТБ с начальными плотностями в диапазоне от $1,3$ до $1,91 \text{ г/см}^3$:

- 1) кривая Пополато — зависимость глубины детонации от нагружающего давления для ВВ с различной начальной плотностью ($1,91$; $1,895$; $1,886$; $1,874 \text{ г/см}^3$) [1, 8];
- 2) инициирование ВВ на расходящейся УВ:

- влияние начальной плотности ВВ (1,91; 1,89; 1,853; 1,79 г/см³) на размер невыгоревших зон при постоянном размере инициатора [9];
- влияние поперечного размера инициатора в образцах ВВ с начальной плотностью 1,782 г/см³ [10];
- ударно-волновое инициирование детонации в образцах ВВ с малой плотностью (1,4 и 1,6 г/см³) [1].

Для описания этой совокупности экспериментальных данных оказалось возможным выделить 6 интервалов по плотности (в г/см³), в которых k_1 и k_2 являются постоянными:

$$(k_1, k_2) = \begin{cases} (0; 0) & \text{при } \rho_0 \geq 1,915; \\ (0,22; 0,023) & \text{при } 1,8925 \leq \rho_0 < 1,915; \\ (0,8; 1) & \text{при } 1,888 \leq \rho_0 < 1,8925; \\ (1,53; 1,82) & \text{при } 1,8775 \leq \rho_0 < 1,888; \\ (3,41; 6,28) & \text{при } 1,741 \leq \rho_0 < 1,8775; \\ (917; 4\,202) & \text{при } \rho_0 > 1,741. \end{cases}$$

Поведения k_1 и k_2 имеют кусочно-постоянный характер. Как следует из рис. 2, экспериментальная зависимость ударно-волновой чувствительности ВВ типа ТАТБ от начальной плотности [1] существенно различается в разных диапазонах по плотности. Для наглядности на рис. 2 нанесены интервалы плотности, в которых k_1 и k_2 являются постоянными.

Таким образом, не изменяя функционального вида формул кинетики и значений ее параметров при вычислении выгорания ВВ вблизи фронта УВ, авторы ввели коэффициент k , зависящий от пористости ВВ и кусочно-постоянных коэффициентов k_1 и k_2 , что позволяет автоматически

учитывать зависимость чувствительности ВВ на основе ТАТБ от начальной плотности.

Приведем результаты некоторых расчетов для иллюстрации возможностей кинетики МК при описании поведения ВВ типа ТАТБ при пониженной начальной плотности ($\rho_0 < 1,91$ г/см³).

Расчет диаграммы Пополато. Наиболее простыми для численного моделирования и подбора параметров моделей кинетики детонации являются эксперименты по определению глубины детонации в зависимости от приложенного давления. Обычно результаты таких экспериментов представлены в виде так называемой диаграммы Пополато.

Постановка экспериментов по определению глубины детонации такова, что позволяет проводить расчеты в одномерном приближении. Моделируемая система представляет собой одномерный образец ВВ, нагружаемый с одной из сторон плоским импульсом давления.

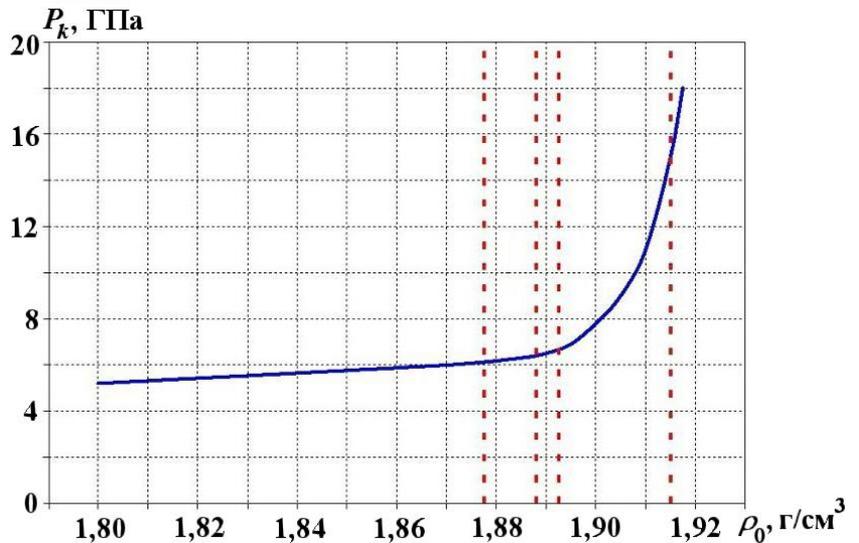


Рис. 2. Экспериментальная зависимость порогового давления от начальной плотности ВВ типа ТАТБ [1]

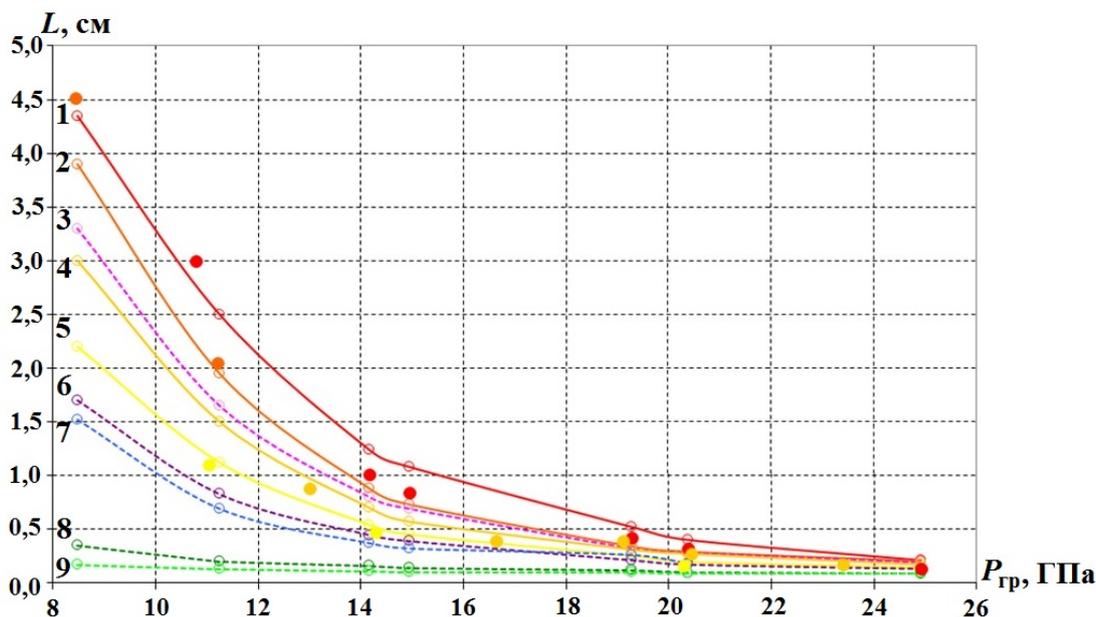


Рис. 3. Диаграмма Пополато (зависимость глубины детонации от нагружающего давления) для ВВ типа ТАТБ пониженной плотности: ● — эксперимент, $\rho_0 = 1,91 \text{ г/см}^3$; ● — эксперимент, $\rho_0 = 1,895 \text{ г/см}^3$; ● — эксперимент, $\rho_0 = 1,886 \text{ г/см}^3$; ● — эксперимент, $\rho_0 = 1,874 \text{ г/см}^3$; 1 — расчет, $\rho_0 = 1,91 \text{ г/см}^3$; 2 — расчет, $\rho_0 = 1,895 \text{ г/см}^3$; 3 — расчет, $\rho_0 = 1,89 \text{ г/см}^3$; 4 — расчет, $\rho_0 = 1,886 \text{ г/см}^3$; 5 — расчет, $\rho_0 = 1,874 \text{ г/см}^3$; 6 — расчет, $\rho_0 = 1,79 \text{ г/см}^3$; 7 — расчет, $\rho_0 = 1,782 \text{ г/см}^3$; 8 — расчет, $\rho_0 = 1,6 \text{ г/см}^3$; 9 — расчет, $\rho_0 = 1,4 \text{ г/см}^3$

В рассматриваемом случае использовались данные экспериментов [1, 8], в которых определена глубина возбуждения детонации в зависимости от приложенного к ВВ давления. Из рис. 3 (см. также цветную вкладку) видно, что в расчетах воспроизводится характер изменения чувствительности ВВ типа ТАТБ в зависимости от начальной плотности и приложенного давления на границе.

Численное моделирование влияния начальной плотности ВВ на основе ТАТБ на размер невыгоревших зон при постоянном размере инициатора. В этой серии расчетов демонстрируется влияние начальной плотности ВВ на основе ТАТБ ($\rho_0 = 1,91; 1,89; 1,853; 1,79 \text{ г/см}^3$) на размер зон непрореагировавшего ВВ. Начальная геометрия задачи приведена на рис. 4. На образце ВВ на основе ТАТБ размером $3 \text{ см} \times 5 \text{ см}$ расположен накладной инициатор из высокочувствительного ВВ размером $1 \text{ см} \times 1,5 \text{ см}$. Постановка экспериментов [9] позволяет проводить расчеты 1/2 части геометрии в плоском двумерном приближении.

Иницирование накладного инициатора осуществлялось в точке на плоскости симметрии слева, а процесс распространения детонации в нем моделировался как идеальный. Процесс возникновения

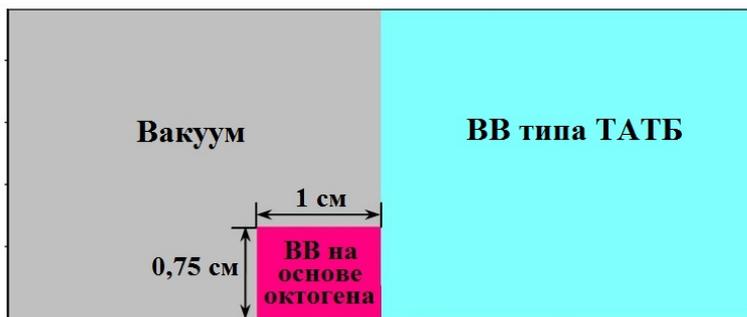


Рис. 4. Начальная геометрия (1/2 часть) расчетной задачи для ВВ типа ТАТБ с различной начальной плотностью

и распространения детонации в исследуемом образце ВВ на основе ТАТБ моделировался с использованием кинетики МК.

На рис. 5 (см. также цветную вкладку) приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных. Видно, что в расчетах, как и в эксперименте, при уменьшении начальной плотности ВВ на основе ТАТБ происходит значительное уменьшение зон непрореагировавшего ВВ. Расчеты хорошо согласуются с экспериментом по положению фронта детонационной волны (ДВ) и размеру невыгоревших зон ВВ.

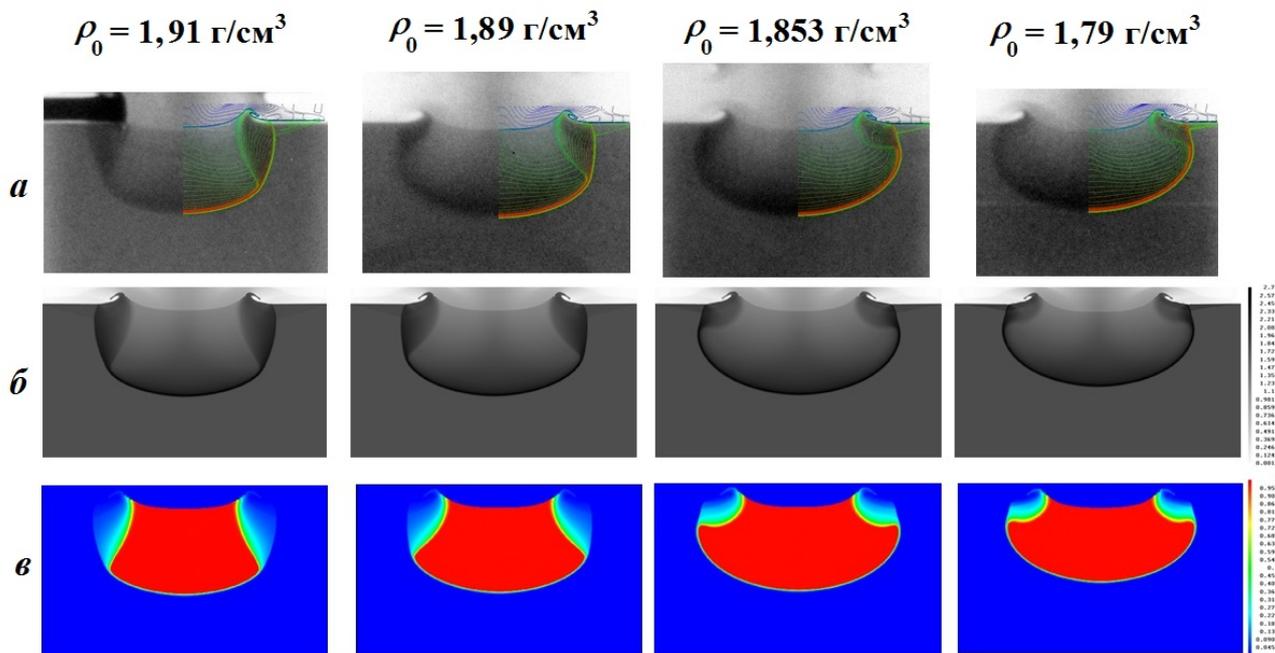


Рис. 5. Сравнение расчетных и экспериментальных данных задачи для ВВ типа ТАТБ с различной начальной плотностью: *a* — изолинии плотности, наложенные на рентгенограммы; *b* — расчетное поле плотности; *c* — поле выгорания ВВ, $t = 3,33$ мкс

Верификация алгоритма автоматического учета состояния ВВ перед фронтом УВ на основе экспериментальных данных

Численное моделирование процесса формирования и распространения детонации в ВВ на основе ТАТБ пониженной начальной плотности с использованием кинетики МК и алгоритма учета начального состояния ВВ показало качественное и количественное согласие с экспериментальными данными. Однако плотность ВВ может отличаться от нормальной ($\rho_0 = 1,91$ г/см³) не только из-за технологии изготовления, но и в результате различных предварительных воздействий, не вызывающих детонацию. Поэтому разработанный алгоритм автоматического учета состояния ВВ перед фронтом нагружающей волны использовался для численного моделирования экспериментов с многократным нагружением ВВ типа ТАТБ.

Иницирование ВВ на основе ТАТБ после разгрузки в зазор. В [11] приведены данные экспериментов, в которых образцы ВВ ТАТБ плотностью 1,9–1,91 г/см³ нагружались расходящейся УВ. В экспериментах исследовался процесс возбуждения детонации на отраженной от преграды волне при наличии зазора между ВВ и преградой (т. е. когда ВВ подвергается разгрузке) и при его отсутствии. Начальная геометрия задачи приведена на рис. 6.

Исследуемое ВВ на основе ТАТБ нагружалось УВ от накладного инициатора из ВВ на основе ТЭНа. Процесс детонации в инициаторах моделировался в приближении идеальной детонации.

Процесс взрывчатого превращения в ВВ на основе ТАТБ (возбуждение или отказ детонации) моделировался с использованием кинетики МК с алгоритмом учета зависимости чувствительности от плотности вещества перед нагружающей волной.

На рис. 7 приведено сравнение полей плотности, полученных в расчетах, с экспериментальными рентгенограммами. В расчетах так же, как и в эксперименте, инициирование ВВ на основе ТАТБ произошло на отраженной УВ только в случае с зазором в 0,1 см и большим инициатором (1 см).

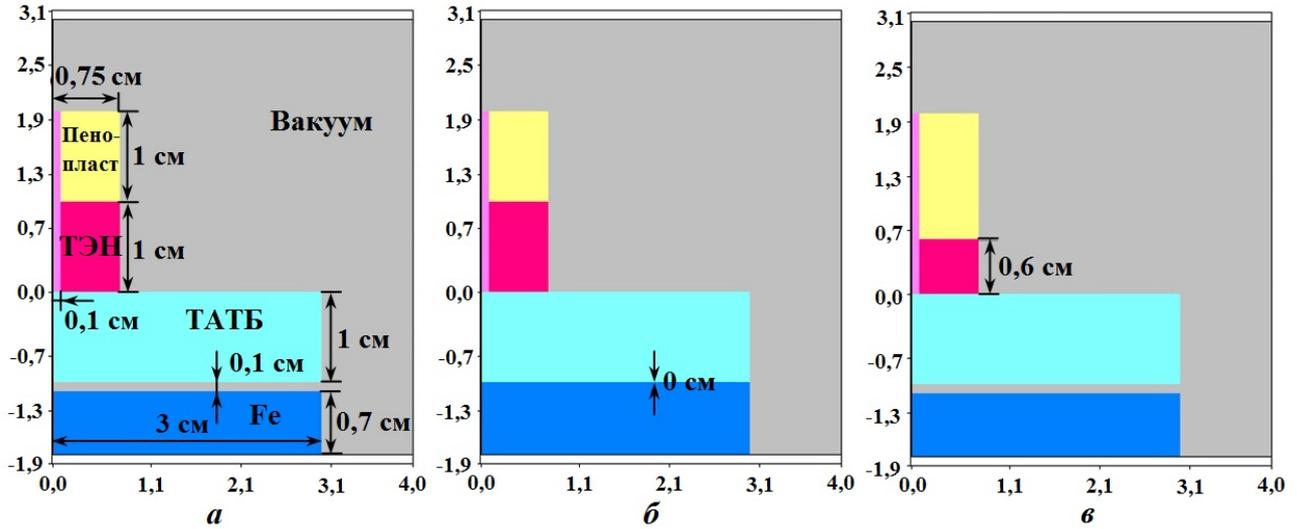


Рис. 6. Начальная геометрия задачи с разгрузкой в зазор: *a* — инициатор высотой 1 см, зазор в 0,1 см; *б* — инициатор высотой 1 см, без зазора; *в* — инициатор высотой 0,6 см, зазор в 0,1 см

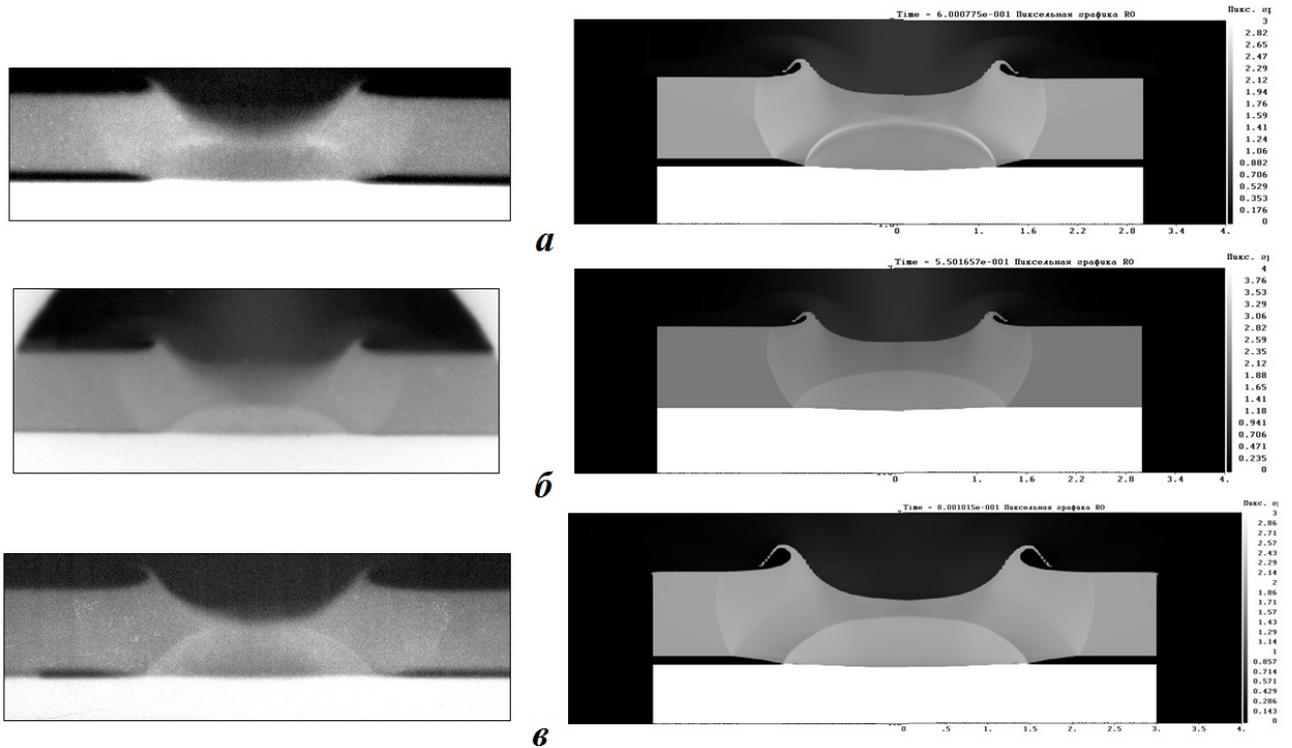


Рис. 7. Сравнение экспериментальных рентгенограмм (слева) и расчетных полей плотности (справа) для задачи с разгрузкой в зазор: *a* — инициатор высотой 1 см, зазор в 0,1 см; *б* — инициатор высотой 1 см, без зазора; *в* — инициатор высотой 0,6 см, зазор в 0,1 см

При отсутствии зазора между исследуемым ВВ и преградой инициирование на отраженной волне не происходит. Иницирование ВВ типа ТАТБ не происходит и в случае инициатора высотой 0,6 см.

Детальное изучение расчетных полей плотности и нагружающих импульсов дает объяснение полученных результатов. В расчетах с инициатором высотой 1 см нагружающее давление на отраженной волне составляет ≈ 15 ГПа. Однако в случае с зазором ВВ успевает разгрузиться до плотности $\rho_{fon} = 1,6 \text{ г/см}^3$ и происходит инициирование детонации, а в расчете без зазора ВВ остается пережатым, $\rho_{fon} = 2,3 \text{ г/см}^3$, и детонации не возникает. В случае же с инициатором высотой 0,6 см ВВ разгружается до плотности $\rho_{fon} = 1,6 \text{ г/см}^3$, как и в случае с инициатором в 1 см, но нагружающего давления около 7 ГПа оказывается недостаточно для формирования детонации.

Иницирование ВВ на основе ТАТБ плоской волной после разгрузки в пенопласт. В опыте [12] образец ВВ на основе ТАТБ (рис. 8) плотностью $\rho = 1,91 \text{ г/см}^3$ в форме параллелепипеда с размерами $12 \text{ см} \times 2 \text{ см} \times 4,5 \text{ см}$ нагружался косой УВ (с допороговой интенсивностью) с нижней поверхности от скользящей детонации тонкого слоя (0,2 см) ВВ на основе ТЭНа, инициируемого справа по торцу. Косая УВ проходит по образцу и в части образца выходит в легкий слой (пенопласт), расположенный на противоположной поверхности образца. Обратно в образец идет волна разгрузки, а УВ продвигается дальше по образцу. В некоторый момент времени одна часть образца остается в исходном невозмущенном состоянии, вторая, соседняя часть, нагружена УВ, а в третьей части образца уже произошла разгрузка. С задержкой происходит нагружение плоской УВ от другого заряда, размещенного на пенопласте. В результате все указанные зоны образца одновременно нагружаются плоской УВ, которая распространяется по исследуемому образцу и создает область однократного и двукратного сжатия, воздействуя на область разгрузки.

Процесс распространения детонации в инициирующих слоях ВВ моделировался в приближении идеальной детонации, а процесс формирования и распространения детонации в исследуемом ВВ ТАТБ — с использованием кинетики МК.

На рис. 9 (см. также цветную вкладку) приведено сравнение результатов расчета с экспериментальной рентгенограммой. Видно, что и в эксперименте, и в расчете в ВВ на основе ТАТБ формируются три зоны: ненагруженное ВВ, поджатое ВВ и разгруженное ВВ. В обоих случаях инициирование исследуемого образца от верхней нагружающей волны происходит только в зоне с разгруженным ВВ, а в зоне, не подвергавшейся воздействию, и в поджатом ВВ детонации не возникает.

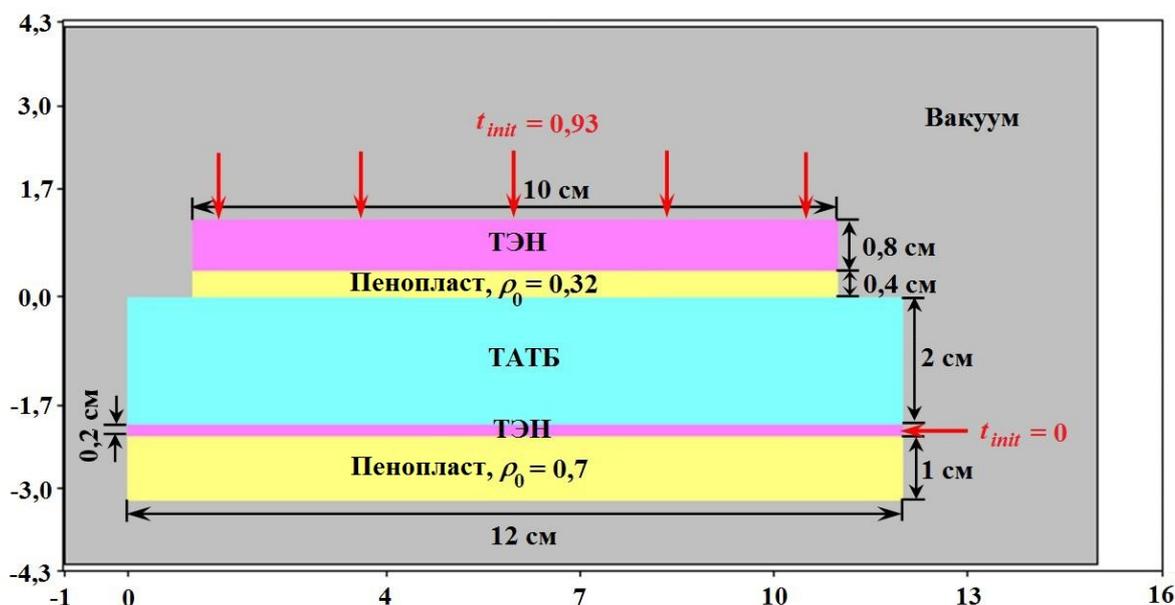


Рис. 8. Начальная постановка задачи с разгрузкой в пенопласт

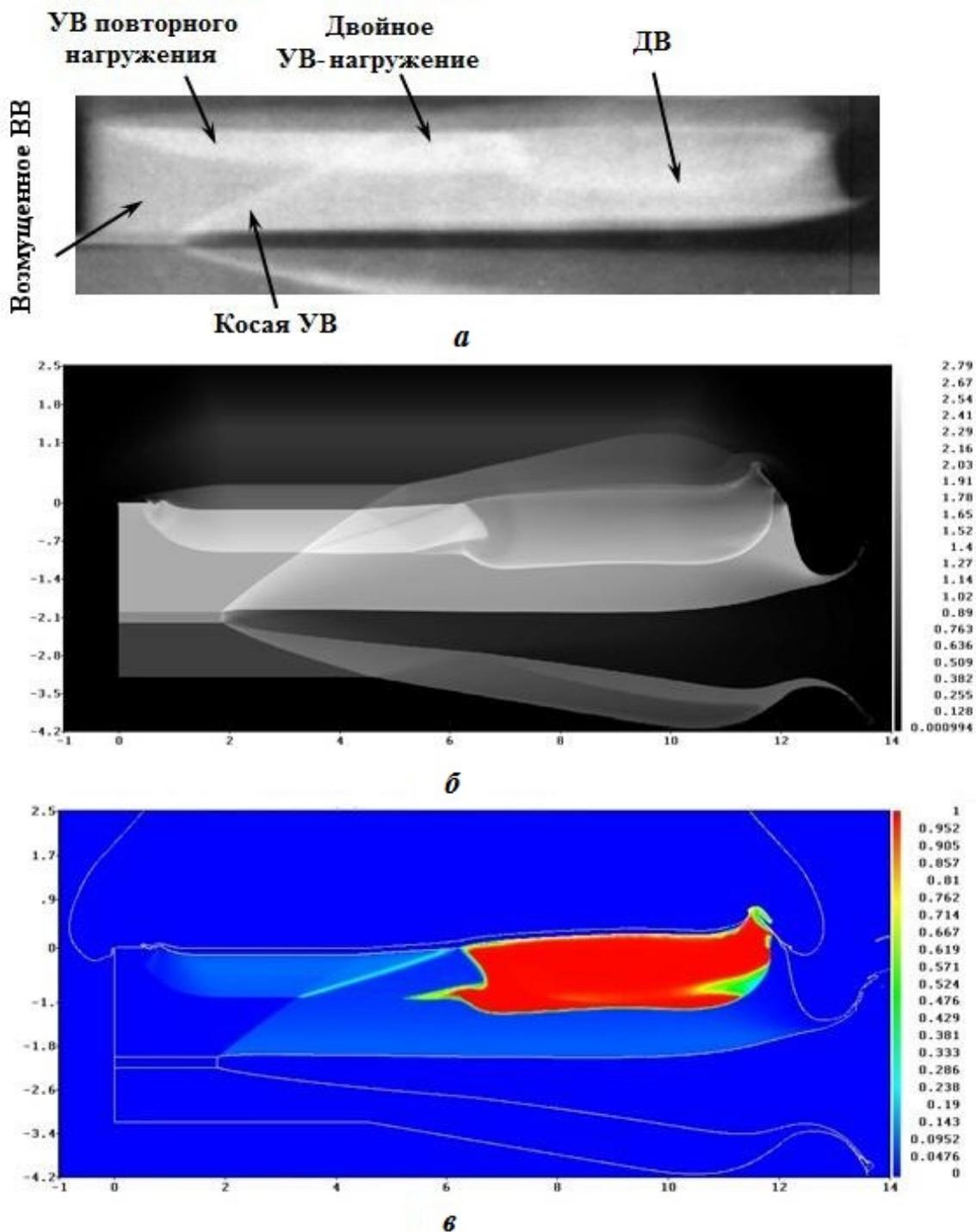


Рис. 9. Сравнение экспериментальных рентгенограмм (а), расчетных полей плотности (б) и выгорания ВВ (в) для задачи с разгрузкой в пенопласт

Расчеты показали, что от верхнего инициатора через демпфер приходит нагружающий импульс давления около 18 ГПа. Этого импульса оказывается недостаточно для инициирования невозмущенного ($\rho_{fon} = 1,91 \text{ г/см}^3$) и поджатого ($\rho_{fon} = 2,4 \text{ г/см}^3$) ВВ. В области разгрузки плотность ВВ на основе ТАТБ падает до $\rho_{fon} = 1,4 \text{ г/см}^3$ и происходит инициирование ДВ и ее дальнейшее распространение.

Моделирование снижения ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ при сжатии слабой УВ (десенсибилизация ВВ). Необходимо, чтобы наряду с опытами, в которых ВВ проявляет свои сенсibilизационные свойства, предложенный алгоритм автоматического учета зависимости чувствительности ВВ от начальной плотности описывал эксперименты, в которых проявляются десенсибилизационные свойства ВВ типа ТАТБ, т. е. снижение ударно-волновой чувствительности в области предварительного сжатия ВВ. Эти экспериментальные данные широко известны. Подробное описание постановки эксперимента можно найти в работе [2].

Экспериментальные данные позволяют проводить численное моделирование в плоской двумерной постановке. Начальная геометрия задачи приведена на рис. 10. Система представляет собой 1/4 часть цилиндра из ВВ типа ТАТБ, на срезах которого помещены две иницирующие шашки одинакового размера. Сначала инициировалась шашка ВВ₁ на основе ТЭНа, а затем с задержкой 0,49 мкс — шашка из ВВ₂ на основе октогена. Иницирование шашек производилось в приближении идеальной детонации в точках А и В (см. рис. 10) соответственно.

Результаты расчетов сравнивались с экспериментальной рентгенограммой (рис. 11) по размеру непрореагировавшей области и положению фронтов УВ и ДВ. Из рис. 11 видно, что в обоих случаях от инициатора из ВВ₁ распространяется слабая УВ, а от инициатора из ВВ₂ распространяется ДВ до тех пор, пока она не попадает в область, предварительно сжатую слабой УВ (в эту область детонация не распространяется). Расчеты показали, что в данной серии экспериментов, когда инициирующее давление достаточно велико ($P > 15$ ГПа), ВВ находится в сжатом состоянии ($\rho_{fon} > 2$ г/см³) и его чувствительность резко падает. Когда же нагружающая волна проходит в разгруженную область ($1,85 < \rho_{fon} < 1,91$ г/см³), то ее интенсивность уже недостаточна для инициирования ($P < 6$ ГПа).

Заключение

В рамках методики ЛЭГАК для модели кинетики МК был разработан и реализован алгоритм, автоматически учитывающий зависимость чувствительности ВВ на основе ТАТБ от начальной плотности в диапазоне плотностей $1,3$ г/см³ $\leq \rho_0 \leq 1,91$ г/см³. Математический алгоритм кинетики МК был обобщен на случай многократных ударно-волновых воздействий.

Проведенная модификация модели кинетики МК в методике ЛЭГАК позволила провести численное моделирование опытов по сенсibilизации ВВ типа ТАТБ, которые ранее единым образом описать не удавалось. Модифицированная модель также позволяет описать экспериментальные данные по десенсибилизации ВВ, которые воспроизводились и в предыдущей версии модели кинетики.

Таким образом, в методике ЛЭГАК реализована универсальная модель кинетики МК для ВВ ТАТБ, которая позволяет описывать всю совокупность имеющихся экспериментальных данных и проводить численное моделирование взрывчатого превращения ВВ при многократном воздействии.

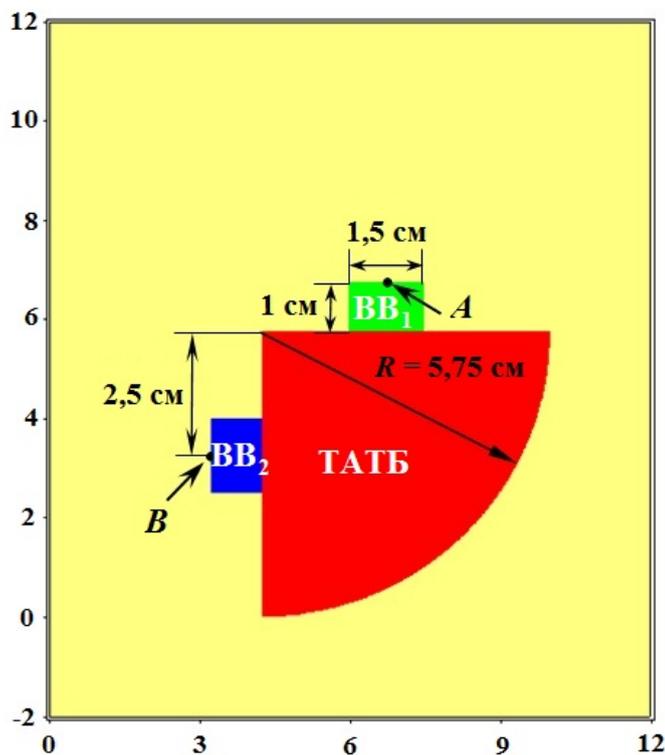


Рис. 10. Начальная геометрия задачи по моделированию десенсибилизации ВВ

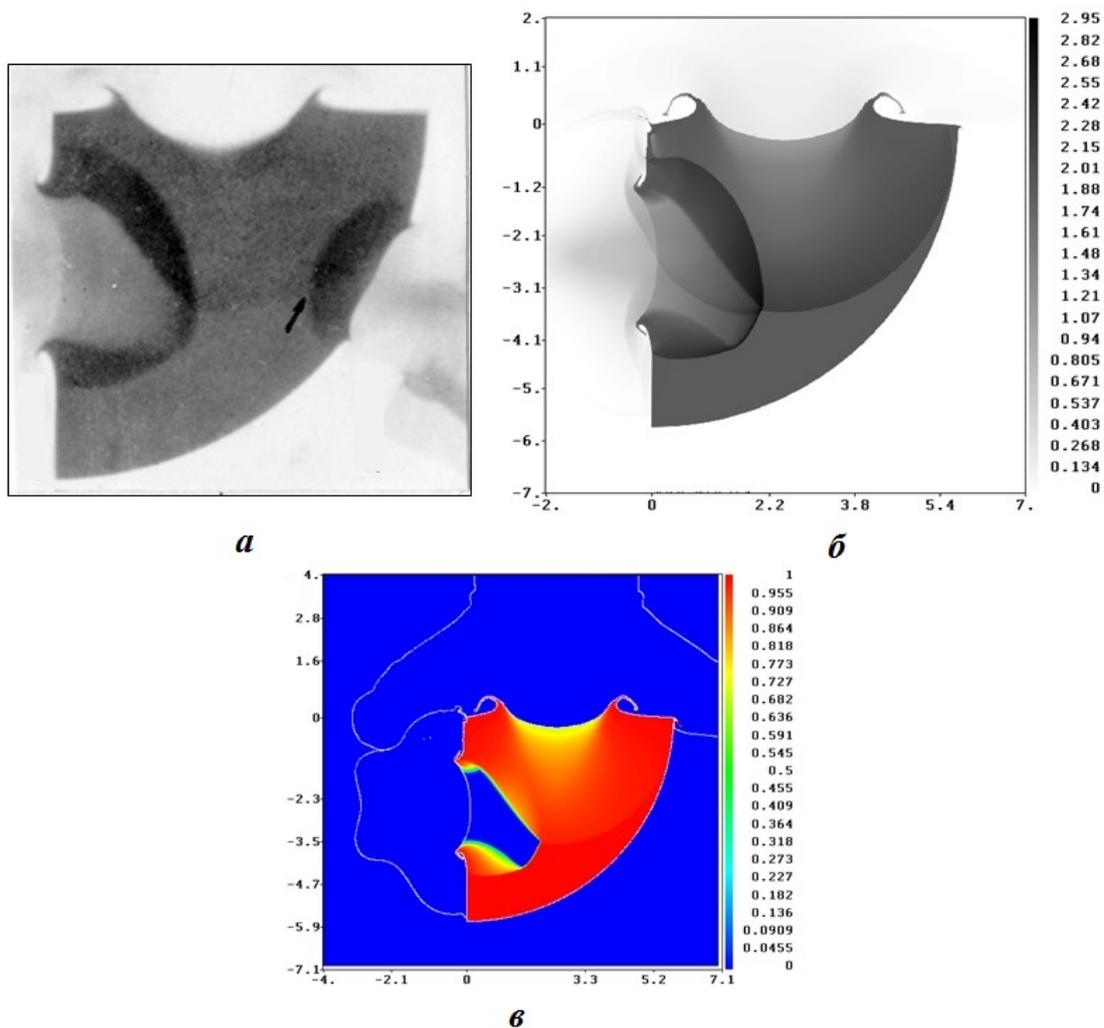


Рис. 11. Сравнение экспериментальных данных и результатов расчетов с автоматическим учетом фоновой плотности для задачи по моделированию десенсибилизации ВВ: а — экспериментальная рентгенограмма; б — расчетное поле плотности; в — расчетное поле концентрации ВВ

Список литературы

1. Власова Ю. А., Косолапов В. Б., Фомичёва Л. В., Хабаров И. П. Влияние температуры, плотности и технологических факторов на ударно-волновую чувствительность пластифицированного ТАТБ // ФГВ. 1998. Т. 34, № 4. С. 110—112.
Vlasova Yu. A., Kosolapov V. B., Fomicheva L. V., Khabarov I. P. Vliyanie temperatury, plotnosti i tekhnologicheskikh faktorov na udarno-volnovuyu chuvstvitelnost plastifitsirovannogo TATB // FGV. 1998. T. 34, N 4. S. 110—112.
2. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Ольхов О. В., Соколов С. С., Шамраев Б. Н., Дмитриева Л. В., Плаксин И. В., Евстигнеев А. А., Ковтун А. Д., Герасименко В. Ф., Шуйкин А. Н., Комрачков В. А., Макаров Ю. М., Герасимов В. М., Шутов В. Н. Расчетное моделирование с опорой на эксперименты инициирования и развития детонации ВВ на основе ТАТБ с учетом десенсибилизации при взаимодействии ударной и детонационной волн: Препринт 37—95. Саратов: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1995.
Morozov V. G., Karpenko I. I., Olkhov O. V., Sokolov S. S., Shamraev B. N., Dmitrieva L. V., Plaksin I. V., Evstigneev A. A., Kovtun A. D., Gerasimenko V. F., Shuykin A. N., Komrachkov V. A., Makarov Yu. M., Gerasimov V. M., Shutov V. N. Raschetnoe modelirovanie s oporoy na eksperimen-

ty initsirovaniya i razvitiya detonatsii VV na osnove TATB s uchedom desensibilizatsii pri vzaimodeystvii udarnoy i detonatsionnoy voln: Preprint 37—95. Sarov: RFYaTs-VNIEEF, 1995.

3. Бахрах С. М., Володина Н. А., Зайцева М. О., Карпенко И. И., Ковтун А. Д., Комрачков В. А., Макаров Ю. М., Морозов В. Г., Рябчун Л. А. Экспериментальное и численное исследование развития процесса детонации ВВ типа ТАТБ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 1. С. 41—56.
Bakhrakh S. M., Volodina N. A., Zaytseva M. O., Karpenko I. I., Kovtun A. D., Komrachkov V. A., Makarov Yu. M., Morozov V. G., Ryabchun L. A. Eksperimentalnoe i chislennoe issledovanie razvitiya protsessa detonatsii VV tipa TATB // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2005. Vyp. 1. S. 41—56.
4. Володина Н. А., Мышкина И. Ю., Спиридонов В. Ф. Исследование влияния счетных параметров при численном моделировании процесса взрывчатого превращения ВВ по кинетике МК в методике ЛЭГАК // Там же. 2010. Вып. 2. С. 3—14.
Volodina N. A., Myshkina I. Yu., Spiridonov V. F. Issledovanie vliyaniya schetnykh parametrov pri chislennom modelirovanii protsessa vzryvchatogo prevrashcheniya VV po kinetike MK v metodike LEGAK // Tam zhe. 2010. Vyp. 2. S. 3—14.
5. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А. Метод расчета течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых координатах // Докл. АН СССР. 1984. Т. 4. С. 829—833.
Bakhrakh S. M., Spiridonov V. F., Shanin A. A. Metod rascheta techeniy neodnorodnoy sredy v lagranzhevo-eylerovykh koordinatakh // Dokl. AN SSSR. 1984. T. 4. S. 829—833.
6. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф., Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бакулина Е. А., Безрукова И. Ю., Борляев В. В., Володина Н. А., Наумов А. О., Огнева Н. Э., Резвова Т. В., Резяпов А. А., Стародубов С. В., Тарадай И. Ю., Тихонова А. П., Циберева К. В., Шанин А. А., Ширшова М. О., Шувалова Е. В. Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41—50.
Bakhrakh S. M., Velichko S. V., Spiridonov V. F., Avdeev P. A., Artamonov M. V., Bakulina E. A., Bezrukova I. Yu., Borlyayev V. V., Volodina N. A., Naumov A. O., Ogneva N. E., Rezvova T. V., Rezyapov A. A., Starodubov S. V., Taraday I. Yu., Tikhonova A. P., Tsiberev K. V., Shanin A. A., Shirshova M. O., Shuvalova E. V. Metodika LEGAK-3D rascheta trekhmernykh nestatsionarnykh techeniy mnogokomponentnoy sploshnoy sredy i printsipy ee realizatsii na mnogoprotsessornykh EVM s raspredelennoy pamatyayu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2004. Vyp. 4. S. 41—50.
7. Костицын О. В., Баталов С. В., Вершинин А. В., Никулин А. А., Мирошкин К. М., Смирнов Е. Б., Лобойко Б. Г., Филлин В. П. Относительное изменение ударно-волновой чувствительности образцов ВВ на основе ТАТБ при их термическом старении // Семинар по старению энергетических материалов. Монтерей, США. 22—26 июля 2002 г.
Kostitsyn O. V., Batalov S. V., Vershinin A. V., Nikulin A. A., Miroshkin K. M., Smirnov E. B., Loboyko B. G., Filin V. P. Otnositelnoe izmenenie udarno-volnovoy chuvstvitelnosti obraztsov VV na osnove TATB pri ikh termicheskom starenii // Seminar po stareniyu energeticheskikh materialov. Monterey, SShA. 22—26 iyulya 2002 g.
8. Родионов А. В., Бельский В. М., Богданов Е. Н., Михайлов А. Л., Комиссаров В. В., Седов А. А. Определение глубины возбуждения детонации радиоволновым методом в пластифицированных октогене и ТАТБ // Межд. конф. "Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны". XI Харитоновские тематические науч. чтения: сб. науч. тр. / Под ред. А. Л. Михайлова. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. С. 69—73.
Rodionov A. V., Belskiy V. M., Bogdanov E. N., Mikhaylov A. L., Komissarov V. V., Sedov A. A. Opredelenie glubiny vozvuzhdeniya detonatsii radiovolnovym metodom v plastifitsirovannykh oktoгене i TATB // Mezhd. konf. "Ekstremalnye sostoyaniya veshchestva. Detonatsiya. Udarnye

- volny". XI Kharitonovskie tematicheskie nauch. chteniya: sb. nauch. tr. / Pod red. A. L. Mikhaylova. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2009. S. 69—73.
9. *Комрачков В. А., Ковтун А. Д., Макаров Ю. М.* Применение импульсной рентгенографии для исследования ударно-волнового инициирования ТАТБ // ФГВ. 1999. Т. 35, № 2. С. 96—101.
Komrachkov V. A., Kovtun A. D., Makarov Yu. M. Primenenie impulsnoy rentgenografii dlya issledovaniya udarno-volnovogo initsirovaniya TATB // FGV. 1999. T. 35, N 2. S. 96—101.
10. *Бурцев В. В., Комрачков В. А., Панов К. Н., Ковтун А. Д., Руднев А. В., Сырунин М. А.* Исследования инициирования детонации в ТАТБ методом протонной радиографии // Там же. 2012. Т. 48, № 3. С. 1—8.
Burtsev V. V., Komrachkov V. A., Panov K. N., Kovtun A. D., Rudnev A. V., Syrunin M. A. Issledovaniya initsirovaniya detonatsii v TATB metodom protonnoy radiografii // Tam zhe. 2012. T. 48, N 3. S. 1—8.
11. *Панов К. Н., Комрачков В. А.* Исследование рентгенографическим методом эволюции профиля плотности вещества за фронтом расходящейся ударной волны во взрывчатом веществе // Там же. 2004. Т. 40, № 5. С. 102—108.
Panov K. N., Komrachkov V. A. Issledovanie rentgenograficheskim metodom evolutsii profilya plotnosti veshchestva za frontom raskhodyashcheysya udarnoy volny vo vzryvchatom veshchestve // Tam zhe. 2004. T. 40, N 5. S. 102—108.
12. *Бурцев В. В., Михайлов А. Л., Панов К. Н., Руднев А. В., Сырунин М. А.* Исследование инициирования детонации во взрывчатом веществе на протонном ускорителе У-70 // Там же. 2011. Т. 47, № 3. С. 115—121.
Burtsev V. V., Mikhaylov A. L., Panov K. N., Rudnev A. V., Syrunin M. A. Issledovanie initsirovaniya detonatsii vo vzryvchatom veshchestve na protonnom uskoritele U-70 // Tam zhe. 2011. T. 47, N 3. S. 115—121.

Статья поступила в редакцию 03.12.18.

RESULTS OF NUMERICAL SIMULATIONS OF VARIATIONS IN THE SHOCK SENSITIVITY OF TATB-TYPE HIGH EXPLOSIVES IN RESPONSE TO MULTIPLE SHOCK WAVES IN THE LEGAK CODE / N. A. Volodina, V. B. Titova, M. O. Shirshova (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod Region).

The paper presents the results of modification of the MK detonation kinetics model in the LEGAK code to enable universal accounting for the shock sensitivity of TATB-based HE depending on its state before the front of the initiating shock wave. The changes in the model apply to the formula responsible for the density of hot-spot formation near the shockwave front, and to the algorithm for shock wave front tracking and analysis of the state of matter before the shock-wave front. The realized modification of the MK model was tested using experimental data for TATB-based HE with initial densities of $1,3 \text{ г/см}^3 \leq \rho_0 \leq 1,91 \text{ г/см}^3$.

The proposed algorithm enables automatic accounting for the state of HE before the shock front and uniform description of experimental data for both sensitizing and desensitizing of HE in response to multiple shock waves.

Keywords: detonation kinetics, shock sensitivity, TATB.

УДК 519.6

УСЛОВИЕ ВЫБОРА МАЖОРАНТЫ В МЕТОДЕ "МАКСИМАЛЬНОГО СЕЧЕНИЯ"

Н. В. Иванов

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

При решении уравнений переноса частиц методом Монте-Карло для упрощения моделирования пробегов частиц широко используется метод *максимального сечения*. На численном примере показано, что этот метод приводит к правильному распределению пробегов частиц только при соблюдении одного условия: соответствующая максимальному сечению плотность распределения пробегов должна быть нормирована.

Ключевые слова: уравнение переноса частиц, метод Монте-Карло, моделирование пробегов частиц, выбор максимального сечения.

Введение

Решение задач переноса методом Монте-Карло находится путем построения траекторий частиц. Столкновения частицы с атомами среды делят траекторию на отрезки случайной длины. На каждом отрезке движение частицы описывается уравнением $\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \vec{\Omega}t$, где \vec{r}_0 , $\vec{\Omega}$ — положение и направление полета в начале отрезка, t — пройденный путь. Для постоянной интенсивности столкновений σ длина отрезка (пробега) разыгрывается из экспоненциального распределения с плотностью $p(t) = \sigma \exp(-\sigma t)$. В неоднородной среде интенсивность является функцией пути: $\sigma(t) = \sigma(\vec{r}(t))$. В этом случае пробег находится из обобщенного экспоненциального распределения с плотностью

$$p(t, \sigma) = \sigma(t) \exp(-T(t)), \quad t > 0, \quad T(t) = \int_0^t \sigma(u) du, \quad (1)$$

где $T(t)$ — оптическая толщина отрезка пути t . Стандартный алгоритм розыгрыша пробега τ сводится к решению уравнения

$$T(\tau) = -\ln(1 - \xi), \quad (2)$$

где ξ — случайное число, равномерно распределенное в интервале $(0, 1)$. В некоторых случаях плотность (1) может быть ненормированной, тогда пробеги находятся из уравнения

$$T(\tau) = -\ln(1 - C\xi), \quad (3)$$

где $C = 1 - \exp(-T(\infty))$ — нормировка плотности $p(t, \sigma)$.

Для произвольной интенсивности решение уравнений (2), (3) может потребовать больших вычислительных затрат. В этом случае используется метод *максимального сечения*. Он основан на выборе мажорантной интенсивности $\sigma_m(t) \geq \sigma(t)$ и определении пробега с плотностью $p(t, \sigma)$ с помощью следующего алгоритма.

Шагами строится последовательность случайных величин S_k :

$$S_0 = 0; \quad S_k = S_{k-1} + t_k, \quad k = 1, 2, \dots,$$

где t_k — случайные пробеги, распределенные с условными плотностями

$$f_m(t, S_{k-1}) = \sigma_m(S_{k-1} + t) \exp\left(T_m(S_{k-1}) - T_m(S_{k-1} + t)\right), \quad T_m(s) = \int_0^s \sigma_m(s') ds'.$$

Последовательность S_k обрывается с вероятностью $\sigma(S_k)/\sigma_m(S_k)$, и пробег с плотностью $p(t, \sigma)$ полагается равным $\tau = S_k$. Розыгрыш вероятности обрыва сводится к проверке на каждом шаге условия $\xi_k \leq \sigma(s_k)/\sigma_m(s_k)$, где ξ_k — независимые случайные числа. Значения t_k находятся из уравнения

$$\int_0^{t_k} \sigma_m(S_{k-1} + t) dt = -\ln(1 - C_{k-1}\xi), \quad C_{k-1} = \int_0^\infty f(t, S_{k-1}) dt = 1 - \exp\left(T_m(S_{k-1}) - T_m(\infty)\right),$$

где C_{k-1} — нормировка плотности $f(t, S_{k-1})$.

В задачах переноса частиц шаг алгоритма заканчивается столкновением. Последнему шагу соответствует реальное столкновение, а остальные столкновения называются фиктивными. Эффективность метода определяется средним числом столкновений, затраченных на моделирование одного реального столкновения. Обоснованию метода посвящен ряд статей [1–3], и он широко используется при решении задач переноса частиц [3, 4]. Отметим, что в этих работах выбор мажоранты ограничивается только эффективностью метода.

Покажем на простом примере, что мажоранта должна удовлетворять некоторому условию.

Пусть интенсивность столкновений имеет вид $\sigma(t) = \sigma_0 \exp(-\alpha t)$. Тогда нормированная плотность распределения пробегов равна

$$p(t) = \frac{\sigma(t)e^{-T(t)}}{C}, \quad T(t) = \sigma_0(1 - e^{-\alpha t})\alpha, \quad C = 1 - e^{-\sigma_0/\alpha}.$$

Для моделирования этой плотности рассмотрим две мажоранты:

$$\sigma_1(t) = \sigma_0 \exp(-\hat{\alpha}t), \quad \hat{\alpha} \leq \alpha; \quad \sigma_2(t) = \frac{\sigma_0}{1 + \alpha t}.$$

Соответствующие нормированные плотности пробегов равны

$$p_1(t) = \frac{\sigma_1(t)e^{-T_1(t)}}{C_1}, \quad T_1(t) = \frac{\sigma_0(1 - e^{-\hat{\alpha}t})}{\hat{\alpha}}, \quad C_1 = 1 - e^{-\sigma_0/\hat{\alpha}};$$

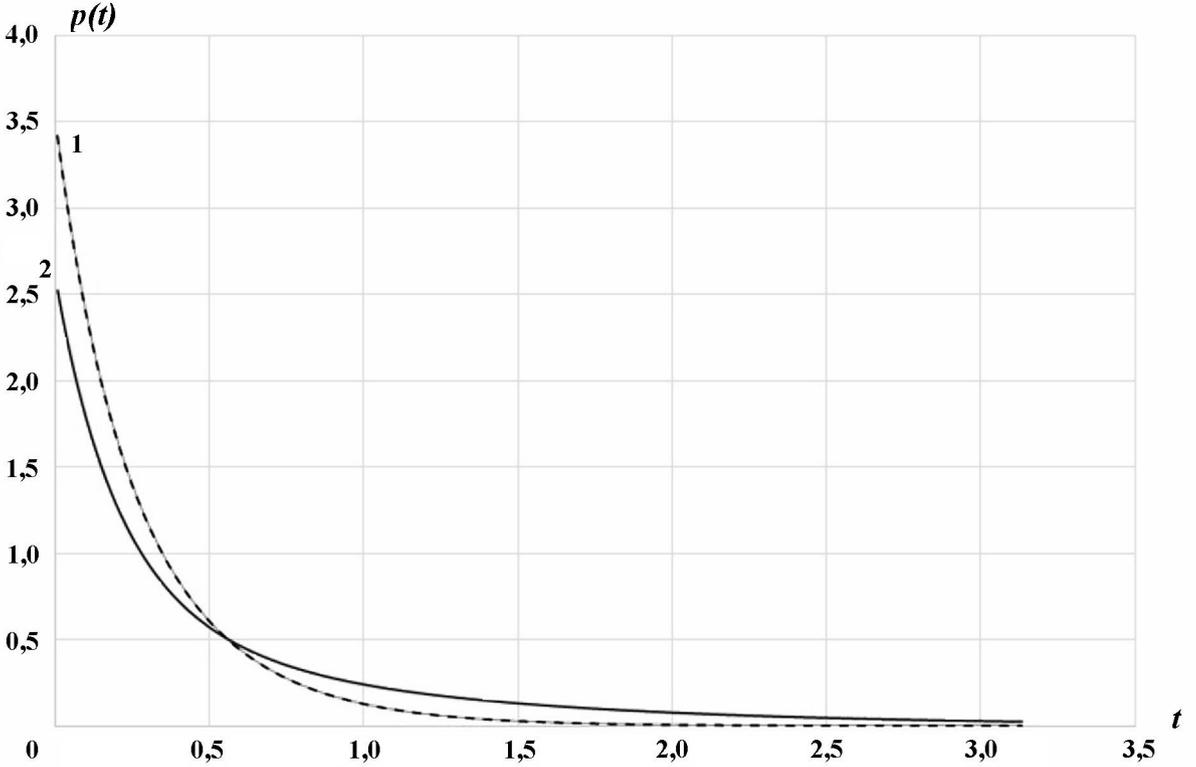
$$p_2(t) = \frac{\sigma_2(t)e^{-T_2(t)}}{C_2}, \quad T_2(t) = \frac{\sigma_0 \ln(1 + \alpha t)}{\alpha}, \quad C_2 = 1.$$

Для выбранных мажорант описанный алгоритм легко реализуется. На k -м шаге пробеги t_{ik} из плотностей $p_i(t)$ разыгрываются по формулам

$$t_{1k} = -\frac{1}{\hat{\alpha}} \ln\left(1 + \frac{\hat{\alpha} \ln(1 - \xi C_1)}{\sigma_1(S_{k-1})}\right), \quad S_k = \sum_{n=1}^k t_{1n};$$

$$t_{2k} = \frac{(\exp(-\alpha \ln(1 - \xi C_2)/\sigma_0) - 1) \sigma_0}{\alpha \sigma_2(S_{k-1})}, \quad S_k = \sum_{n=1}^k t_{2n}.$$

Для сравнения мажорант были выполнены расчеты плотности пробегов $p(t)$ для $\alpha = 3$ путем моделирования 10^{10} траекторий. Значения плотности в точках t_k оценивались как интегральные средние по окрестности $(t_k - h/2, t_k + h/2)$, $h = \pi/200$. Относительная точность расчетов составляет не менее 0,01%. Результаты расчетов приведены на рисунке.



Расчеты плотности $p(t)$ с помощью мажорант $\sigma_1(t)$ и $\sigma_2(t)$: 1 — аналитическое решение; 2 — расчет с первой мажорантой ($\hat{\alpha} = 2$); — — — расчет со второй мажорантой

Видно, что расчет плотности пробегов со второй мажорантой ($\sigma_2(t)$) совпадает с аналитическим решением. В то же время расчет с первой мажорантой ($\sigma_1(t)$) заметно отличается.

Причина несовпадения становится понятной из следующих рассуждений. На малом интервале Δt вероятность более одного столкновения является величиной порядка $o(\Delta t)$. Следовательно, вероятность $P\{\tau \in \Delta t\}$ пробега τ из интервала Δt с точностью до бесконечно малых более высокого порядка равна $\sigma(t)\Delta t$. Обозначим через $P\{\tau_m \in \Delta t\}$ вероятность пробега из интервала Δt для мажорантной интенсивности. Тогда, используя теорему умножения вероятностей, получаем, что в методе максимального сечения

$$P\{\tau \in \Delta t\} = \frac{\sigma(t)}{\sigma_m(t)} P\{\tau_m \in \Delta t\} = \frac{\sigma(t)}{\sigma_m(t)} \int_t^{t+\Delta t} f_m(t', s_0) dt' = \frac{\sigma(t)}{\sigma_m(t)} \frac{\sigma_m(t)}{C_0} \Delta t + o(\Delta t).$$

Следовательно, этот метод приводит к правильному результату только при условии $C_0 = 1$, которое эквивалентно требованию

$$T_m(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty. \tag{4}$$

Условию (4) удовлетворяет только вторая мажоранта. В практических расчетах обычно используются постоянные мажоранты, которые всегда удовлетворяют условию (4). Однако, в экспоненциальной атмосфере более эффективным может быть метод максимального сечения с мажорантой, зависящей от толщины атмосферы. Докажем, что при выполнении условия (4) алгоритм метода максимального сечения приводит к правильному обобщенному экспоненциальному распределению.

Для постоянной мажоранты доказательство приведено в работе [4]. Для переменной мажоранты оно проводится аналогичным образом. Пусть для проверки неравенств $\xi_k \leq \sigma(S_k)/\sigma_m(S_k)$ используется последовательность ξ_1, ξ_2, \dots независимых равномерно распределенных величин на $(0, 1)$. Согласно алгоритму, если k_0 — первое из значений k , для которого выполняется это неравенство, то

S_{k_0} является реализацией случайной величины с плотностью распределения $p(t, \sigma)$. Действительно, функция распределения величины S_{k_0} определяется равенством

$$P \{S_{k_0} < x\} = \sum_{n=1}^{\infty} P(E_n), \quad (5)$$

где E_n есть событие, что реальным столкновением закончится n -й шаг и $S_n < x$:

$$E_n = \{\xi_1 > g(S_1), \xi_2 > g(S_2), \dots, \xi_{n-1} > g(S_{n-1}), \xi_n \leq g(S_n), S_n < x\}, \quad g(x) < \sigma(x)/\sigma_m(x).$$

При фиксированных значениях t_n : $t_1 = x_1, t_2 = x_2, \dots, t_n = x_n$ и, следовательно, фиксированных $S_k = \sum_{i=1}^{k-1} x_i$ получаем

$$P \{E_n | \xi_i = x_i (i = 1, \dots, n)\} = \prod_{k=1}^{n-1} P \left\{ \xi_k > g \left(\sum_{i=1}^k t_i \right) \middle| \xi_i = x_i (i = 1, \dots, k) \right\} \times \\ \times P \left\{ \xi_n \leq g \left(\sum_{i=1}^n t_i \right) \middle| \xi_i = x_i (i = 1, \dots, n) \right\} = g \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \prod_{k=1}^{n-1} q \left(\sum_{i=1}^k x_i \right),$$

где $q(x) = 1 - g(x)$.

Поскольку все случайные величины t_k независимы и имеют нормированные плотности $f(t, S_{k-1}) = f_m(t, S_{k-1})/C_{k-1}$, то

$$P \{E_n\} = \int_0^x dx_1 f(x_1, S_0) \int_0^{x-x_1} dx_2 f(x_2, S_1) \int_0^{x-x_1-x_2} \dots \int_0^{x-x_1-\dots-x_{n-1}} dx_n \times \\ \times f(x_n, S_{n-1}) q(x_1) q(x_1 + x_2) \dots q(x_1 + \dots + x_{n-1}) g(x_1 + \dots + x_n). \quad (6)$$

Положим $y_j = \sum_{i=1}^j x_i$ и учтем, что при выполнении условия (4) все $C_k = 1$. Тогда

$$f(x_k, S_{k-1}) = \sigma_m(y_k) \exp \left(T_m(y_{k-1}) - T_m(y_k) \right).$$

Подставляя эти выражения в (6), получаем

$$P \{E_n\} = \int_0^x dx_1 \sigma_m(y_1) \int_0^{x-y_1} dx_2 \sigma_m(y_2) \int_0^{x-y_2} dx_3 \dots \int_0^{x-y_{n-1}} dx_n \sigma_m(y_n) e^{-T_m(y_n)} q(y_1) q(y_2) \dots q(y_{n-1}) g(y_n).$$

Так как $x_i (i = 1, 2, \dots, n)$ меняются в пределах $0 \leq x_i \leq x - \sum_{k=1}^{i-1} x_k$, то y_j изменяются в пределах $y_{j-1} \leq y_j \leq x$. Поэтому, делая замену переменных в (6) и меняя порядок интегрирования, получаем

$$P \{E_n\} = \int_0^x dy_n \int_0^{y_n} dy_{n-1} \dots \int_0^{y_2} dy_1 \sigma_m(y_1) \sigma_m(y_2) \dots \sigma_m(y_n) e^{-T_m(y_n)} q(y_1) q(y_2) \dots q(y_{n-1}) g(y_n).$$

Воспользуемся равенством из [3]:

$$\int_0^{y_n} \sigma_m(y_{n-1}) q(y_{n-1}) dy_{n-1} \dots \int_0^{y_2} \sigma_m(y_1) q(y_1) dy_1 = \frac{1}{(n-1)!} \left(\int_0^{y_n} \sigma_m(u) q(u) du \right)^{n-1}.$$

Учитывая его, имеем

$$P\{E_n\} = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x dy_n e^{-T_m(y_n)} \sigma_m(y_n) g(y_n) \left(\int_0^{y_n} \sigma_m(u) q(u) du \right)^{n-1}.$$

Подставляя это выражение в (5), получаем

$$\begin{aligned} P\{S_{k_0} < x\} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x e^{-T_m(y_n)} \sigma_m(y_n) g(y_n) \left(\int_0^{y_n} \sigma_m(u) q(u) du \right)^{n-1} dy_n = \\ &= \int_0^x e^{-T_m(y) + \int_0^y \sigma_m(u) q(u) du} \sigma_m(y) g(y) dy = \int_0^x e^{-\int_0^y \sigma_m(u) g(u) du} \sigma_m(y) g(y) dy = 1 - e^{-\int_0^x \sigma(u) du}. \end{aligned}$$

Следовательно, при условии (4) метод максимального сечения приводит к обобщенному экспоненциальному распределению.

Список литературы

1. Михайлов Г. А., Аверина Т. А. Алгоритм максимального сечения в методе Монте-Карло // Докл. АН. 2009. Т. 428, № 2. С. 163–165.
Mikhaylov G. A., Averina T. A. Algoritm maksimalnogo secheniya v metode Monte-Karlo // Dokl. AN. 2009. T. 428, N 2. S. 163–165.
2. Аверина Т. А. Методы статистического моделирования неоднородного пуассоновского ансамбля // Сибирский журнал вычислительной математики. 2009. Т. 12, № 4. С. 361–368.
Averina T. A. Metody statisticheskogo modelirovaniya neodnorodnogo puassonovskogo ansamblya // Sibirsky zhurnal vychislitelnoy matematiki. 2009. T. 12, N 4. S. 361–368.
3. Михайлов Г. А., Рагузинский С. В. Модифицированный метод мажорантной частоты для численного моделирования обобщенного экспоненциального распределения // Докл. АН. 2012. Т. 444, № 4. С. 28–30.
Mikhaylov G. A., Raguzinsky S. V. Modifitsirovanny metod mazhorantnoy chastoty dlya chislenного modelirovaniya obobshchennogo eksponentsialnogo raspredeleniya // Dokl. AN. 2012. T. 444, N 4. S. 28–30.
4. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1971.
Ertaikov S. M. Metod Monte-Karlo i smezhnyye voprosy. M.: Nauka, 1971.

Статья поступила в редакцию 19.12.18.

CHOICE CONDITION FOR THE MAJORANT IN "MAXIMUM CROSS-SECTION" METHOD / N. V. Ivanov (FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov, N. Novgorod region).

When solving particle transfer equations using Monte-Carlo method to simplify the simulation of paths of particles the method of maximum cross-section is widely used. Using a numerical example we show that this method results into the correct distribution of paths of particles if only one condition is observed: the path distribution density that corresponds to the respective maximum cross-section should be normalized.

Keywords: particle transfer equation, Monte-Carlo method, simulation of paths of particles, the choice of maximum cross-section.

УДК 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ АЭРОДИНАМИКИ СО СТАТИЧЕСКОЙ АДАПТАЦИЕЙ СЕТКИ ПОД ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ

А. В. Стручков, А. С. Козелков, Р. Н. Жучков, А. А. Уткина, А. В. Саразов
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлено описание алгоритма численного решения задач аэродинамики, основанного на выделении областей ударных волн и последующем измельчении в них расчетной сетки посредством метода адаптивно-встраиваемых сеток. Применяемый метод основан на дроблении ячеек за счет добавления новых узлов на грани. Выделение области ударных волн для адаптации осуществляется с использованием критерия на основе градиента давления и градиента плотности. Предлагаемый алгоритм реализован на произвольных неструктурированных сетках и ориентирован на конечно-объемную дискретизацию системы уравнений Навье—Стокса. Применение алгоритма демонстрируется на задачах о трансзвуковом обтекании профиля NASA0012 и сверхзвуковом обтекании клина. Показано, что использование предложенного метода адаптивных сеток существенно улучшает качество численного решения, полученного на грубых сетках.

Ключевые слова: аэродинамика, численное моделирование, адаптивные сетки, трансзвуковое и сверхзвуковое течение, ударные волны.

Введение

Задачи внешней и внутренней аэродинамики характеризуются одновременным присутствием зон с трансзвуковыми и сверхзвуковыми скоростями течения. Сложность моделирования таких течений обуславливается наличием в потоке ударных волн (УВ). Сформировавшиеся скачки уплотнения воздействуют на пограничные слои, что является причиной процессов отражения волн сжатия и разрежения, отрыва потока и других нестационарных явлений, вызывающих локальный рост потерь кинетической энергии потока и коэффициента трения [1–5]. Это, в свою очередь, влияет на точность определения аэродинамических свойств исследуемых объектов.

К методам численного моделирования таких течений предъявляются достаточно жесткие требования как по точности описания процесса, так и по отказоустойчивости численного решения. На практике это осуществляется за счет использования максимально подробной сетки и применения численных схем повышенного порядка аппроксимации [6–9].

Использование численных схем повышенного порядка аппроксимации достаточно отработано. Методы улучшения сходимости решения основываются на многосеточных технологиях [10–12] и применении лимитирующих функций [13], а параметры их использования достаточно универсальны.

Применение указанного подхода требует построения качественной расчетной сетки большого размера. Этот подход получил практическое применение в расчетах на блочно-структурированных сетках [14, 15], однако диапазон геометрических объектов, описываемых такими сетками, ограничен. Кроме того, сложная процедура сшивки решений, полученных в различных подобластях с использованием интерполяционных функций, не позволяет описывать течения с достаточной степенью точности, да и построение таких функций, обеспечивающих наименьшую погрешность, весьма нетривиально.

От этих недостатков свободны неструктурированные сетки. Они обладают большей гибкостью при дискретизации физических обла-

стей сложной геометрической конфигурации и обеспечивают возможность полной автоматизации процесса построения сетки. В настоящее время именно такие сетки широко применяются при решении большинства промышленно-ориентированных задач [16].

Основной проблемой при использовании неструктурированных сеток (как и структурированных) является возможная потеря точности решения из-за недостаточного сеточного разрешения, особенно в области УВ. Хорошее сеточное разрешение требуется и для моделирования турбулентности с использованием современных LES- и DES-моделей [17, 18]. Это приводит к тому, что при выборе сетки необходимо правильно определять размер ячеек, чтобы подробно описать все составляющие поток структуры, не подавить сеточной вязкостью мелкомасштабные составляющие и при этом не уйти за разумные пределы используемых вычислительных ресурсов.

Одним из эффективных методов повышения сеточного разрешения в области УВ, а также правильного описания вихревых структур при моделировании турбулентности является применение локального измельчения сетки в таких областях. Однако на этапе построения расчетной сетки предопределение точного положения особенностей решения для построения локального измельчения ячеек нетривиально: положение области измельчения приходится определять из общих соображений, а ее размер выбирать "с запасом". Зачастую это приводит к получению весьма избыточной по размерам сетки. Таким образом, возникает потребность в автоматизации процесса определения локальной области сгущения сеточной модели для более точного разрешения физических особенностей течения.

Избежать трудоемкой ручной генерации таких сеток помогает метод динамически адаптивных сеток [4, 19], позволяющий на основе получаемого решения автоматически измельчать сетку лишь в тех областях, для которых локально требуется это решение улучшить. По способу подстраивания под особенности решения динамически адаптивные сетки делятся на адаптивно-подвижные и адаптивно-встраиваемые [2–4].

При использовании адаптивно-подвижных сеток число элементов сетки не изменяется. Для улучшения решения и повышения его точности узлы первоначальной сетки перемещаются в области с высокими градиентами газодинамических переменных, тем самым создавая в обла-

сти особенности решения локальное сгущение. Наряду с достоинствами указанного метода отметим его недостаток — возможное сильное искажение сетки с последующей потерей точности решения.

Для рассматриваемых задач более подходящей является адаптивно-встраиваемая сетка, уменьшение размеров ячеек которой осуществляется посредством встраивания дополнительных ячеек. Данный подход позволяет измельчать только определенную часть расчетной сетки без ее изменения в области с гладким решением. В работах [20–22] разработанные методы адаптивно-встраиваемых сеток применяются в основном на структурированных сетках или на неструктурированных сетках, но с ячейками определенной формы.

В настоящей работе представлен метод адаптивно-встраиваемых сеток для неструктурированных сеток с ячейками произвольной формы. Метод на основе анализа градиентов физических величин автоматически определяет область локального измельчения. Затем к ячейкам внутри обозначенной области применяется алгоритм дробления, основанный на разбиении за счет добавления новых узлов. Предлагаемый алгоритм применяется отдельно от процесса решения, т. е. сначала проводится расчет на основной сетке, и только затем сетка дробится.

Основные сведения

При дискретизации уравнений Навье—Стокса в численной методике применяется метод конечных объемов, основанный на интегрировании исходных дифференциальных уравнений, записанных в дивергентном виде [21], по контрольному объему. Контрольные объемы (ячейки сетки) являются произвольными многогранниками, в общем случае ограниченными произвольным числом граней и покрывающими расчетную область без зазоров и наложений. Вершинами (узлами) граней являются узлы сетки. Общий вид ячейки произвольной неструктурированной сетки показан на рис. 1.

При дискретизации все переменные определяются в центрах ячеек сетки, конвективные и диффузионные потоки рассчитываются через грань ячейки. Для хранения данных используется модель памяти *face-based*, в которой ведущую роль играют грани ячеек. В соответствии с этой моделью памяти данные содержат следующие элементы сетки:

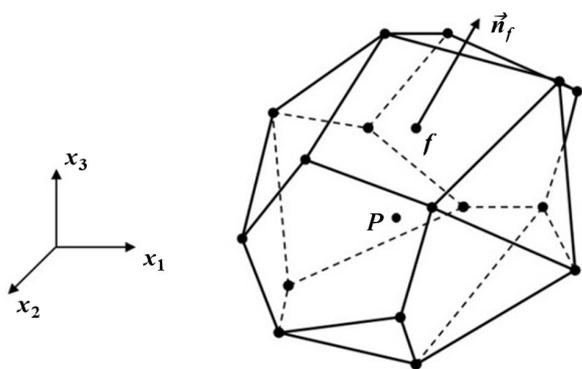


Рис. 1. Общий вид ячейки сетки

- узел — номер и координаты;
- грань — номера двух ячеек, для которых грань является общей, количество узлов грани и номера этих узлов;
- ячейка — количество образующих ее граней и номера этих граней.

Каждый n -мерный элемент сетки (ячейка или грань) представляется в виде списка из s узлов $\{p_1, \dots, p_s\}$, упорядоченных некоторым образом.

Метод статической адаптации расчетной сетки

В основе предлагаемого метода адаптации расчетной сетки лежит алгоритм дробления ячеек, основанный на разбиении граней, образующих ячейку. Рассмотрим алгоритм адаптации на примере шестигранной ячейки.

Для формирования новых граней исходной ячейки необходимо добавить новые узлы в центр каждой грани и на середину каждого ребра (рис. 2, *a*).

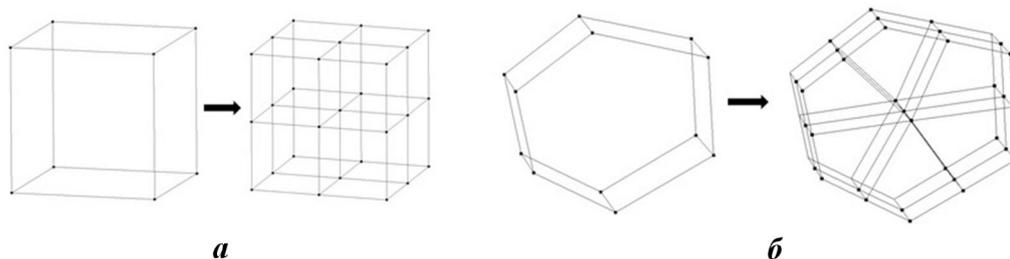


Рис. 2. Добавление новых узлов в центр грани и на середину ребер (*a* — для шестигранной ячейки; *b* — для ячейки в форме произвольного многогранника)

Для формирования новых граней внутри исходной ячейки в ее центр добавляется новый узел (рис. 3), координаты которого известны.

В итоге из исходной ячейки имеем 8 адаптивных ячеек — ячеек первого уровня адаптации. Таким образом, строится новая адаптивная сетка, имеющая области локального измельчения и используемая для дальнейшего расчета.

Описанный алгоритм допускает многоуровневую адаптацию: он также может быть применен к ячейкам первого уровня адаптации, формируя при этом ячейки второго уровня, и т. д. Число вложенных уровней адаптации ограничивается лишь минимальным объемом адаптивной ячейки, задаваемым пользователем. Отметим, что число адаптивных ячеек определяется числом узлов, образующих исходную ячейку. Представленный алгоритм также обобщается на ячейки в форме произвольного выпуклого многогранника. Пример разбиения подобной ячейки показан на рис. 2, *б*. Отмеченные свойства данного алгоритма делают его универсальным и применимым на произвольных неструктурированных сетках.

В предложенном алгоритме необходимо предусмотреть механизм интерполяции решения с исходной сетки на адаптивную. Методом, позволяющим избежать потери точности при интерполяции, является прямой перенос решения с исходной сетки на адаптивную. Всем адаптивным ячейкам присваивается решение, взятое из исходной ячейки. Продолжение счета на новой, измельченной, сетке с учетом полученного решения на исходной сетке позволяет минимизировать количество итераций, необходимых для уточнения решения.

Для применения предложенного алгоритма необходимо определить области измельчения ячеек сетки, для чего используют критерии адаптации [3–6, 22, 23]. Далее описан критерий адаптации, применяемый в настоящей работе.

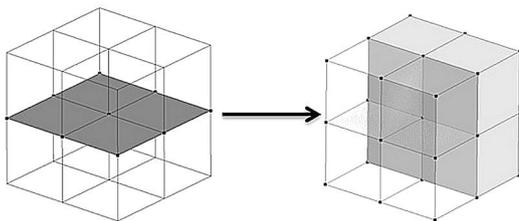


Рис. 3. Формирование граней внутри ячейки и образование ячеек первого уровня адаптации

Критерии адаптации расчетной сетки

Локальное измельчение сетки, как правило, производится в тех подобластях расчетной области, в которых необходимо повысить точность решения. В случае задач внешней аэродинамики к таким подобластям прежде всего относится фронт УВ.

Для введения адаптации в указанных областях (подобластях) применяется явное выделение области пользователем либо расположение области определяется автоматически. Так как фронт УВ имеет достаточно сложную форму, то выделить вручную представляющую интерес область локального измельчения с наименьшим вовлечением в нее лишних ячеек весьма непросто. В этом случае область целесообразно выделять автоматически на основе некоторого численного критерия. Для автоматического определения области УВ, возникающей при трансзвуковом или сверхзвуковом обтекании, наиболее подходящим критерием является значение функции на основе градиента газодинамической величины [22, 23]:

$$f = (V_{cell})^{1/3} |\nabla F|, \quad (1)$$

где V_{cell} — объем ячейки; ∇F — градиент газодинамической величины. Величина $(V_{cell})^{1/3}$ в выражении (1) является характерным размером ячейки и позволяет учесть зависимость значения критерия f от объема ячейки. Таким образом, максимальное значение функции критерия будет достигаться в ячейках с наибольшим объемом и большим значением градиента, что обеспечит попадание в область локального измельчения крупных ячеек в области сильного изменения газодинамических величин (например, УВ). Минимальное значение критерия f характерно для области с плавным изменением газодинамических величин и достигается в ячейках с наименьшим объемом и малым значением градиента, что приведет к их исключению из области локального измельчения.

В данной работе в качестве газодинамической величины F используется плотность или давление. Эти величины наиболее подходят для выделения области УВ [22], так как их градиенты в этой области будут принимать максимальные значения.

Рассмотрим применение критерия (1) на примере автоматического выделения областей скачка уплотнения и фронта УВ при трансзвуковом обтекании аэродинамического профиля NASA0012 [8, 24, 25] и сверхзвуковом течении в канале с клином [10]. Картины формирующихся при этом течений представлены на рис. 4. Для данных задач взяты параметры потока, соответствующие экспериментам [10, 24, 25]. При обтекании профиля NASA0012 на границах расчетной области задаются число Маха 0,75, статическое давление 84 418,95 Па и температура 260 К, а также направление потока, соответствующее углу атаки профиля 4° . При сверхзвуковом течении в канале с клином во входном сечении канала задаются скорость потока 697,52 м/с, статическое давление 101 325 Па и температура $T = 300$ К, что соответствует числу Маха $M = 2$.

При обтекании профиля NASA0012 происходит формирование отрывной зоны на подветренной его стороне (область А, рис. 4, а). Хотя ударная волна является криволинейной, по своему характеру у поверхности профиля она соответствует нормальному скачку уплотнения (область Б на рис. 4, а), переводящему сверхзвуковое течение в дозвуковое. Качественное описание УВ и правильное определение положения ее фронта повышает точность решения подобного класса задач, одна из целей которых — определение взаимосвязи структуры поля течения вблизи обтекаемого профиля и аэродинамических характеристик.

При сверхзвуковом течении в канале с клином образуется присоединенный скачок уплотнения, приводящий к формированию ударно-волновой структуры потока в канале: зарождению скачка уплотнения, его развитию, отражению от стенок канала и взаимодействию с системой (веером [10]) волн разряжения (область В на рис. 4, б). С точки зрения численного моделирования в областях таких структур потока рекомендуется строить подробную расчетную сетку, что позволит уменьшить степень "размазывания" фронтов (область Г на рис. 4, б) и повысить точность численного решения.

На рис. 5, 6 показано поле f из критерия (1) для задач трансзвукового обтекания профиля и

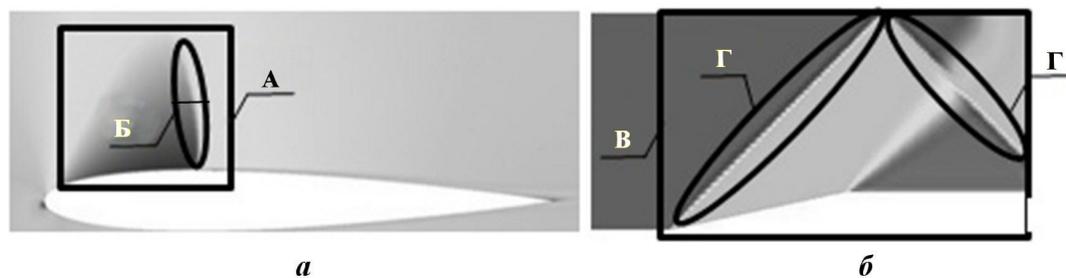


Рис. 4. Поле числа Маха: *a* — при трансзвуковом обтекании профиля *NACA0012*; *b* — при сверхзвуковом течении в канале с клином



Рис. 5. Трансзвуковое обтекание профиля *NACA0012*. Поле распределения функции критерия для плотности (слева) и давления (справа)



Рис. 6. Сверхзвуковое обтекание клина. Поле распределения функции критерия для плотности (слева) и давления (справа)

сверхзвукового обтекания клина. Видно, что область максимального значения функции критерия (1) (на рисунках она имеет чисто белый цвет) как в случае плотности, так и в случае давления совпадает с положением скачка уплотнения и фронта УВ. При этом результаты применения критерия на основе плотности и давления идентичны. Область с максимальным значением функции этого критерия рассматривается как область для локального измельчения расчетной сетки.

При продолжении счета на измельченной сетке положение фронта УВ уточняется: фронт может смещаться и уходить из области локального измельчения. Для исключения этого необходимо в качестве исходных ячеек пометать не только ячейки с сильным изменением газодинамических величин, но и соседние с ними ячейки первого-второго слоев, что позволяет расширить область локального измельчения. Такой подход делает возможным "удерживать" фронт области с высокими градиентами в границах локальной области измельчения.

Ниже рассмотрены результаты использования представленного алгоритма на примере решения задач трансзвукового и сверхзвукового обтекания.

Численные эксперименты

Представленный выше алгоритм реализован в пакете программ ЛОГОС [26] — программном продукте инженерного анализа, предназначенном для решения сопряженных трехмерных задач конвективного теплопереноса, аэродинамики и гидродинамики на параллельных ЭВМ. Пакет программ ЛОГОС успешно прошел валидацию и показал достаточно хорошие результаты на серии различных аэродинамических и гидродинамических задач, включая расчеты турбулентных и нестационарных течений [15, 17, 26, 27].

Валидация численного метода адаптации сетки была проведена на решении задач трансзвукового обтекания профиля *NACA0012* и сверхзвукового обтекания клина.

Сверхзвуковое течение в плоском канале с клином. Рассматривается задача моделирования течения невязкого сжимаемого газа в канале с клином в 10° (рис. 7). При решении задачи выполняется исследование зависимости результатов расчетов от адаптации расчетной сетки в области УВ.

Для расчета используется блочно-структурированная сетка, состоящая из шестигранников и содержащая 95 000 ячеек.

Параметры на входе канала описаны в предыдущем разделе. На боковых границах канала задается граничное условие *жесткая стенка*. На выходе из канала задается давление 101 325 Па.

На рис. 8 (см. также цветную вкладку) представлено поле распределения числа Маха.

В соответствии с сформировавшимся течением построено локальное измельчение расчетной сетки в области фронта УВ (рис. 9).

Расчеты проводились на адаптивных сетках первого и второго уровней, а также на сетке, в 2 раза мельче исходной. Для оценки влияния измельчения расчетной сетки на получаемый результат оценим распределение полного давления вдоль канала для каждой из расчетных сеток (рис. 10, 11; см. также цветную вкладку).

Видно, что в области последней серии скачков амплитуда УВ меньше на исходной сетке, в то время как на сетках первого и второго уровней адаптации, равно как и на сетке, в 2 раза мельче исходной, амплитуда УВ больше. Заметим, что

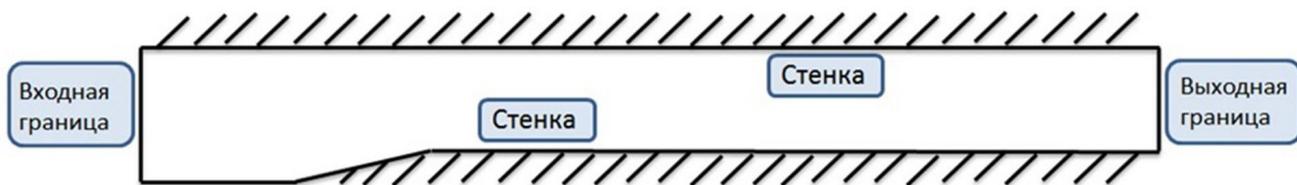


Рис. 7. Течение в плоском канале с клином

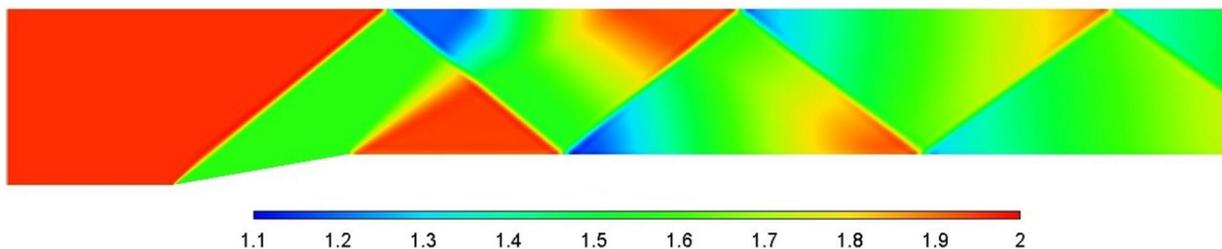


Рис. 8. Поле распределения числа Маха на исходной сетке при сверхзвуковом обтекании клина

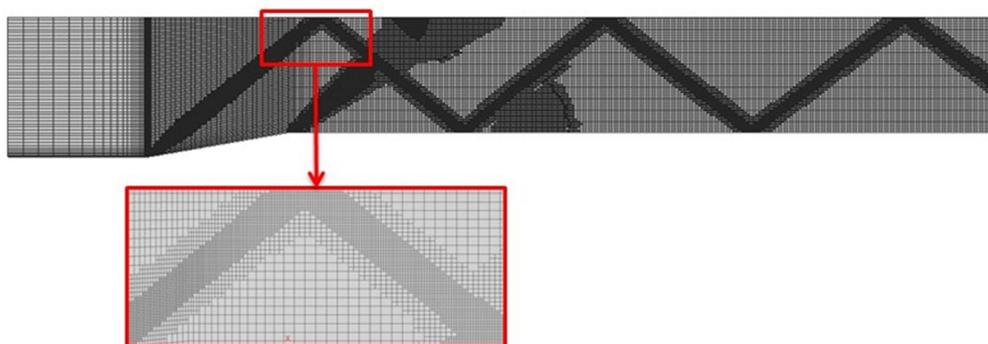


Рис. 9. Локальное измельчение расчетной сетки (2-й уровень адаптации)

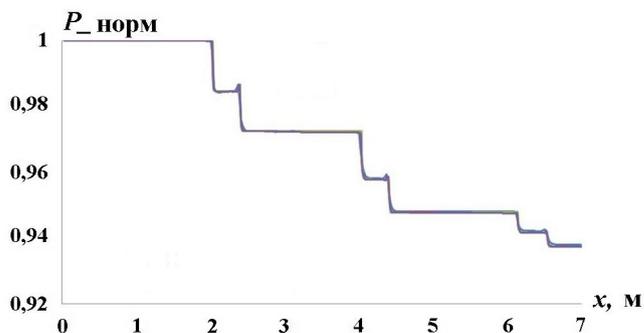


Рис. 10. Распределения полного нормированного давления: — исходная сетка; — сетка 1-го уровня адаптации; — сетка 2-го уровня адаптации; — сетка в 2 раза мельче исходной

в области УВ на сетке второго уровня адаптации ячейки самые мелкие. Однако это измельчение повлияло лишь на меньшую степень размазывания фронта УВ (что логично). Значение амплитуды УВ осталось таким же, как на сетке первого уровня адаптации и сетке, в 2 раза мельче исходной (результаты на этих сетках повторяются). Для сравнения берется заключительная серия скачков, так как на выходе из канала УВ имеет наименьшую интенсивность по сравнению с областью ее формирования. Поэтому более качественное определение фронта УВ на всем ее протяжении способствует более качественному определению ее свойств в конце.

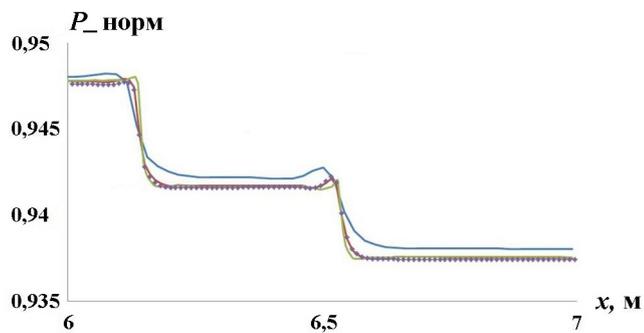


Рис. 11. Распределения полного нормированного давления, укрупненный фрагмент последних скачков: — исходная сетка; — сетка 1-го уровня адаптации; — сетка 2-го уровня адаптации; — сетка в 2 раза мельче исходной

Из представленных результатов (табл. 1, 2) можно сделать вывод, что по амплитуде УВ сеточная сходимость достигается на сетке первого уровня адаптации. При этом измельчение во всей расчетной области не требуется, что показал расчет на сетке, в 2 раза мельче исходной.

Трансзвуковое обтекание профиля NASA0012. Рассматривается задача моделирования течения вязкого сжимаемого газа вдоль профиля NASA0012 при угле атаки $3,04^\circ$. При решении задачи выполняется исследование

Таблица 1

Задача о сверхзвуковом обтекании клина. Время счета на разных сетках

Сетка	Число ячеек	Время одной итерации, с	Число итераций до сходимости
Исходная	95 000	0,24	90
1-го уровня адаптации	201 204	0,54	140
2-го уровня адаптации	563 332	1,9	190
В 2 раза мельче исходной	760 000	2,1	140

Таблица 2

Задача о сверхзвуковом обтекании клина. Полное нормированное давление за скачком (Па) и его отклонение от полученного на сетке, мельче исходной в 2 раза (%)

Сетка	$2 < X < 4$		$4,3 < X < 6$		$6,6 < X < 7$	
	$P_{\text{норм}}$	Отклонение	$P_{\text{норм}}$	Отклонение	$P_{\text{норм}}$	Отклонение
Исходная	0,9725	0,005	0,948	0,028	0,938	0,065
1-го уровня адаптации	0,9724	0,003	0,9478	0,004	0,9375	0,01
2-го уровня адаптации	0,9724	0,0003	0,9478	0,004	0,9375	0,01

зависимости результатов расчета от локального измельчения расчетной сетки в области возникающего скачка уплотнения.

Для расчета используется блочно-структурированная сетка, состоящая из шестигранников и содержащая около 158 000 ячеек. На рис. 12 представлен фрагмент геометрии области с расчетной сеткой.

При обтекании профиля на границах расчетной области задаются число Маха 0,7, статическое давление 46 066,2 Па и температура 248 К, а также направление потока, соответствующее углу атаки профиля 3,04°. На поверхности профиля задается граничное условие *стенка без прилипания*.

На рис. 13 (см. также цветную вкладку) представлено поле распределения числа Маха.

Данный режим обтекания является односкачковым, он характеризуется возникновением УВ у поверхности профиля. Применение алгоритма адаптации в данной задаче дает результат, показанный на рис. 14.

Дальнейший расчет на сетке первого уровня адаптации позволил более качественно прописать УВ. Это подтверждает график распределения коэффициента давления $C_p = \frac{p - p_{ref}}{0,5\rho V^2}$ (p — давление; p_{ref} , ρ — давление и плотность невозмущенного потока) по поверхности в области УВ, который имеет более резкий перепад (рис. 15). Перегиб кривой в окрестности $x = 0,33$ возникает на границе области измельчения в адаптивной сетке, что не является положительным моментом в отношении используемого алгоритма, но в целом не ухудшает получаемого

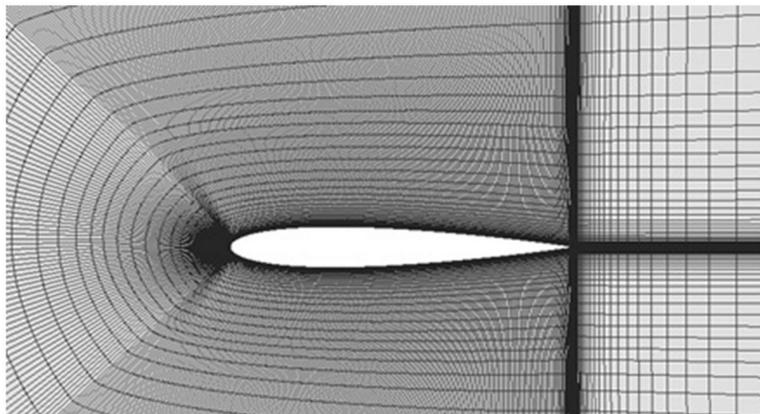


Рис. 12. Расчетная область задачи о трансзвуковом обтекании профиля NASA0012

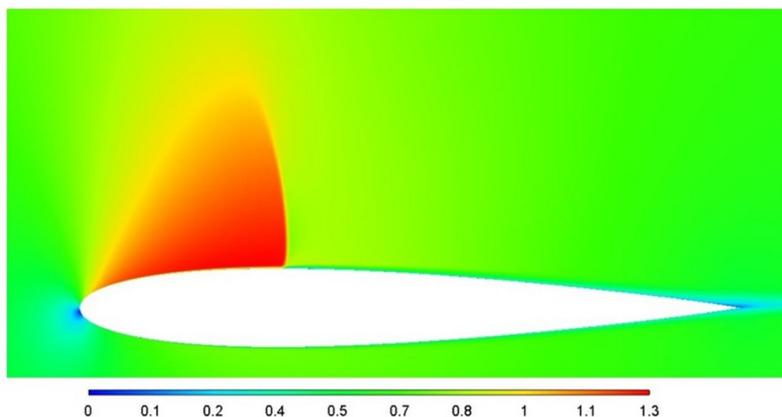


Рис. 13. Поле распределения числа Маха при трансзвуковом обтекании профиля NASA0012

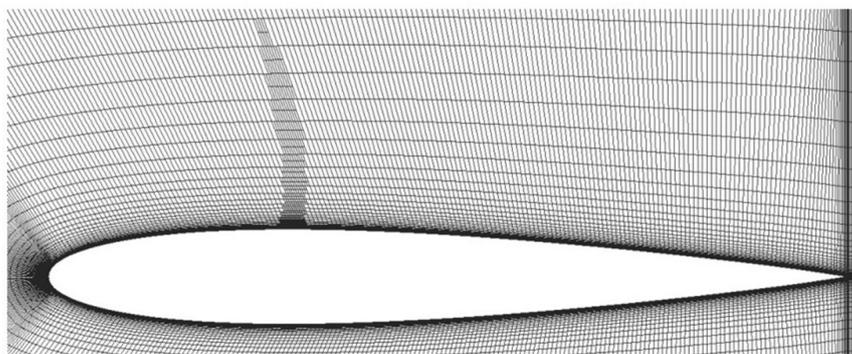


Рис. 14. Сетка 1-го уровня адаптации

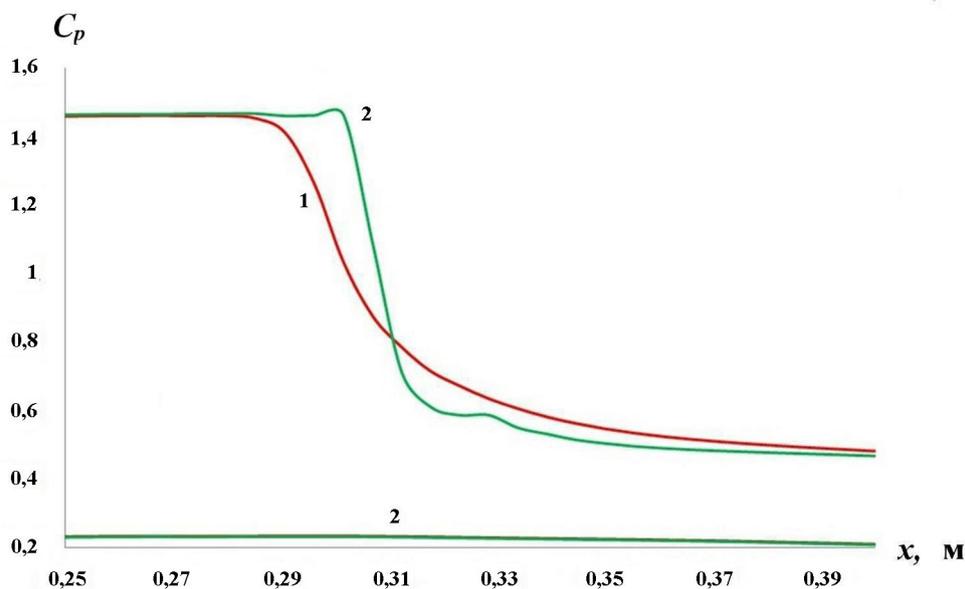


Рис. 15. Распределение коэффициента давления на поверхности профиля в области ударной волны: 1 — исходная сетка; 2 — сетка 1-го уровня адаптации

решения с точки зрения определения аэродинамических характеристик.

В табл. 3 показано сравнение значений коэффициентов лобового сопротивления C_{xa} и подъемной силы C_{ya} , полученных на исходной сетке и сетке первого уровня адаптации, с экспериментальными данными [23]. Также в таблице приведены результаты расчета на сетке, в 2 раза мельче исходной.

Из табл. 3 видно, что измельчение в 2 раза всей расчетной сетки не дает большей точности решения по сравнению с решением, получаемым на сетке первого уровня адаптации, причем обе сетки в области скачка над профилем имеют одинаковый размер ячеек. При этом число ячеек используемых сеток весьма отличается, что существенно повлияло на время сходимости (табл. 4).

Следует отметить, что определение коэффициента лобового сопротивления — непростая задача, точность решения которой напрямую зависит от точности описания УВ, возникающей у поверхности профиля. Представленные данные демонстрируют изменение результатов, а также их зависимость от использования алгоритма адаптации расчетной сетки для ее локального измельчения.

Заключение

В настоящей работе представлены описание алгоритма генерации адаптивно-встраиваемых сеток и его применение к решению задач газовой динамики. Показан принцип работы алгоритма дробления, основанного на добавлении новых уз-

Таблица 3

Сравнение расчетных значений коэффициентов лобового сопротивления и подъемной силы с экспериментальными данными

Вариант расчета	C_{xa}	C_{ya}	Отклонение от эксперимента C_{xa} , %	Отклонение от эксперимента C_{ya} , %
ЛОГОС, исходная сетка	0,0144	0,4808	14,38	4,85
ЛОГОС, сетка 1-го уровня адаптации	0,0142	0,4849	12,54	4,03
ЛОГОС, сетка в 2 раза мельче исходной	0,0143	0,4847	12,86	4,07
Эксперимент	0,0126	0,5054	—	—

Таблица 4

Задача о трансзвуковом обтекании профиля NASA0012. Время счета на разных сетках

Сетка	Число ячеек	Время одной итерации, с	Число итераций до сходимости
Исходная	157 914	0,62	3 200
1-го уровня адаптации	165 159	0,65	3 800
В 2 раза мельче исходной	631 656	2,1	4 000

лов на грани ячейки. Приведено описание структуры памяти, используемой для реализации алгоритма дробления на произвольных неструктурированных сетках. Рассмотрен вопрос выбора критерия для выделения областей УВ и последующего измельчения в них расчетной сетки.

Применимость разработанного метода продемонстрирована на задачах о трансзвуковом обтекании профиля NASA0012 и сверхзвуковом обтекании клина. Показано, что использование предложенного метода адаптивных сеток улучшает качество численного решения, полученного на исходных сетках.

Применению представленного алгоритма к решению промышленно-ориентированных задач будет посвящена отдельная статья.

Работа выполнена при финансовой помощи гранта Президента Российской Федерации по государственной поддержке научных исследований молодых российских ученых — докторов наук (МД-4874.2018.9), государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации (НШ-2685.2018.5), а также финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-01-00267).

Список литературы

1. Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семёнов А. Ю. Математические вопросы

численного решения гиперболической системы уравнений. М.: Физматлит, 2001.

Kulikovskiy A. G., Pogorelov N. V., Semenov A. Yu. Matematicheskie voprosy chislenogo resheniya giperbolicheskoy sistemy uravneniy. M.: Fizmatlit, 2001.

2. Гильманов А. Н. Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики. М.: Физматлит, 2000.

Gilmanov A. N. Metody adaptivnykh setok v zadachakh gazovoy dinamiki. M.: Fizmatlit, 2000.

3. Yanilkin Yu. V., Belyaev S. P., Tarasov V. I., Bondarenko Yu. A., Gorodnichev A. V., Degtyarenko L. I., Kaplunov M. I., Stadnik A. L., Volgin A. V., Voronov E. G., Zharova G. V. Adaptation of the EGAK code for numerical simulations of 2D flows with adaptive built-in refined computational mesh // Meeting on the ISTC Project #436-97. Physical Model and Code Development for Deflagration-to Detonation Transition and Detonation of Hydrogen Containing Mixtures. Cologne, May 17–19, 2000.

4. Код ЭГИДА-2D для моделирования двумерных задач. Учеб. пособие в 2 томах / Под ред. Ю. В. Янилкина. Саров, 2008.

Kod EGIDA-2D dlya modelirovaniya dvumernykh zadach. Ucheb. posobie v 2 tomakh / Pod red. Yu. V. Yanilkina. Sarov, 2008.

5. Коваленко А. А., Нейланд В. Я. Сильное взаимодействие пограничного слоя с гиперзвуковым потоком газа // Ученые записки ЦАГИ. 1975. Т. 6, № 2. С. 28–38.
Kovalenko A. A., Neyland V. Ya. Silnoe vzaimodeystvie pogranychogo sloya s giperzvukovym potokom gaza // Uchenye zapiski TsAGI. 1975. T. 6, N 2. S. 28–38.
6. Булат П. В., Волков К. Н. Применение WENO-схем для моделирования взаимодействия отраженной ударной волны с пограничным слоем // Инженерно-физический журнал. 2015. Т. 88, № 5. С. 1163–1170.
Bulat P. V., Volkov K. N. Primenenie WENO-skhem dlya modelirovaniya vzaimodeystviya otrazhennoy udarnoy volny s pogranychym sloem // Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal. 2015. T. 88, N 5. S. 1163–1170.
7. Козелков А. С., Жучков Р. Н., Уткина А. А., Володченкова К. Б. Моделирование турбулентных течений на сетках гибридной структуры с использованием схем высокого порядка точности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 3. С. 18–31.
Kozelkov A. S., Zhuchkov R. N., Utkina A. A., Volodchenkova K. B. Modelirovanie turbulentnykh techeniy na setkakh gibridnoy struktury s ispolzovaniem skhem vysokogo poriyadka tochnosti // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2014. Vyp. 3. S. 18–31.
8. Chakravarthy S. R., Osher S. A new class of high-accuracy TVD schemes for hyperbolic conservation laws // AIAA Paper. 1985. No 85-0363.
9. Gottlieb S. On high-order strong stability preserving Runge-Kutta and multi step time discretizations // J. Sci. Comp. 2005. Vol. 25, No 1–2. P. 105–128.
10. Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н., Карпенко А. Г., Козелков А. С., Тетерина И. В. Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. М.: Физматлит, 2013.
Volkov K. N., Deryugin Yu. N., Emelyanov V. N., Karpenko A. G., Kozelkov A. S., Teterina I. V. Metody uskoreniya gazodinamicheskikh raschetov na nestrukturirovannykh setkakh. M.: Fizmatlit, 2013.
11. Жуков В. Т., Феодоритова О. Б. Многосеточный метод для конечно-элементных дискретизаций уравнений аэродинамики // Математическое моделирование. 2011. Т. 23, № 1. С. 115–131.
Zhukov V. T., Feodoritova O. B. Mnogosetochnyy metod dlya konechno-elementnykh diskretizatsiy uravneniy aэродинамики // Matematicheskoe modelirovanie. 2011. T. 23, № 1. S. 115–131.
12. Волков К. Н., Дерюгин Ю. Н., Емельянов В. Н., Козелков А. С., Тетерина И. В. Алгебраический многосеточный метод в задачах вычислительной физики // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2014. Т. 15, № 2. С. 183–200.
Volkov K. N., Deryugin Yu. N., Emelyanov V. N., Kozelkov A. S., Teterina I. V. Algebraicheskiy mnogosetochny metod v zadachakh vychislitelnoy fiziki // Vychislitelnye metody i programmirovaniye: novye vychislitelnye tekhnologii. 2014. T. 15, № 2. S. 183–200.
13. Лашкин С. В., Козелков А. С., Глазунова Е. В., Тарасова Н. В., Ялозо А. В. Применение ограничителей градиента при решении уравнений Навье–Стокса на произвольных неструктурированных сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2017. Вып. 2. С. 3–17.
Lashkin S. V., Kozelkov A. S., Glazunova E. V., Tarasova N. V., Yalozo A. V. Primenenie ogranichiteley gradyenta pri reshenii uravneniy Navye–Stoksa na proizvolnykh nestrukturirovannykh setkakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2017. Vyp. 2. S. 3–17.
14. Travin A., Shur M., Strelets M., Spalart P. R. Detached-Eddy Simulations past a Circular Cylinder // Flow. Turb. Comb. 2000. Vol. 63. P. 293–313.
15. Козелков А. С., Курулин В. В., Тятюшккина Е. С., Пучкова О. Л. Моделирование турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости на неструктурированных сетках с использованием модели отсоединенных вихрей // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, № 8. С. 81–96.

- Kozelkov A. S., Kurulin V. V., Tyatyushkina E. S., Puchkova O. L.* Modelirovanie turbulentnykh techeniy vyazkoy neszhimayemy zhidkosti na nestrukturirovannykh setkakh s ispolzovaniem modeli otsoedinennykh vikhrey // *Matematicheskoe modelirovanie*. 2014. T. 26, N 8. S. 81–96.
16. *Погосян М. А., Савельевских Е. П., Шагалев Р. М., Козелков А. С., Стрелец Д. Ю., Рябов А. А., Корнев А. В., Дерюгин Ю. Н., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В.* Применение отечественных суперкомпьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной техники // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2013. Вып. 2. С. 3–17.
Pogosyan M. A., Savelevskikh E. P., Shagaliev R. M., Kozelkov A. S., Strelets D. Yu., Ryabov A. A., Kornev A. V., Deryugin Yu. N., Spiridonov V. F., Tsiberev K. V. Primenenie otechestvennykh superkompyuternykh tekhnologiy dlya sozdaniya perspektivnykh obraztsov aviatsionnoy tekhniki // *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*. 2013. Vyp. 2. S. 3–17.
17. *Козелков А. С., Курулин В. В., Пучкова О. Л., Тятюшклина Е. С.* Моделирование турбулентных течений вязкой несжимаемой жидкости на неструктурированных сетках с использованием модели отсоединенных вихрей // *Математическое моделирование*. 2014. Т. 26, № 8. С. 81–96.
Kozelkov A. S., Kurulin V. V., Puchkova O. L., Tyatyushkina E. S. Modelirovanie turbulentnykh techeniy vyazkoy neszhimayemy zhidkosti na nestrukturirovannykh setkakh s ispolzovaniem modeli vikhrey // *Matematicheskoe modelirovanie*. 2014. T. 26, N 8. S. 81–96.
18. *Козелков А. С., Курулин В. В.* Численная схема для моделирования турбулентных течений несжимаемой жидкости с использованием вихреразрешающих подходов // *Вычислительная математика и математическая физика*. 2015. Т. 55, № 7. С. 135–146.
Kozelkov A. S., Kurulin V. V. Chislennaya skhema dlya modelirovaniya turbulentnykh techeniy neszhimayemy zhidkosti s ispolzovaniem vikhrerazreshayushchikh podkhodov // *Vychislitel'naya matematika i matematicheskaya fizika*. 2015. T. 55, N 7. S. 135–146.
19. Adaptive mesh refinement — theory and applications: Proc. Chicago Workshop on Adaptive Mesh Refinement Methods (Lecture Notes in Comp. Sci. and Eng. September, 3–5, 2003) / Ed. by T. Plewa, T. Linde, Weirs V. Gregory. Chicago: Springer, 2005.
20. *Барахнин В. Б., Карамышев В. Б.* TVD-схема на подвижной адаптивной сетке // *Вычислительные технологии*. 2000. Т. 5, № 1. С. 19–30.
Barakhnin V. B., Karamyshev V. B. TVD-skhem na podvizhnoy adaptivnoy setke // *Vychislitelnye tekhnologii*. 2000. T. 5, N 1. S. 19–30.
21. *Лойцянский Л. Г.* Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1987.
Loytsyanskiy L. G. Mekhanika zhidkosti i gaza. M.: Nauka, 1987.
22. *Daunenhofner J. F., Baron J. R.* Grid Adaption for the 2D Euler Equations. Technical Report AIAA-85-0484. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1985.
23. *Warren G. P., Andersom W. K., Thomas J. L., Krist S. L.* Grid convergence for adaptive methods // AIAA 10th Computational Fluid Dynamics Conference. Honolulu, Hawaii American Institute of Aeronautics and Astronautics. June 1991.
24. *Колесников Г. А., Марков В. К., Михайлюк А. А.* Аэродинамика летательных аппаратов / Под ред. Г. А. Колесникова. М.: Машиностроение, 1993.
Kolesnikov G. A., Markov V. K., Mikhayluk A. A. Aerodinamika letatelnykh apparatov / Pod red. G. A. Kolesnikova. M.: Mashinostroenie, 1993.
25. *Ladson Ch. L., Hill A. S., Johnson W. G.* Pressure Distributions from High Reynolds Number Transonic Tests of an NACA 0012 Airfoil in the Langley 0.3-Meter Transonic Cryogenic Tunnel. NASA Technical Memorandum. Hampton, Virginia: Langley Research Center, 1987.
26. *Дерюгин Ю. Н., Жучков Р. Н., Зеленский Д. К., Козелков А. С., Саразов А. В., Кудимов Н. Ф., Липницкий Ю. М., Панасенко А. В., Сафронов А. В.* Результаты валидации многофункционального пакета программ ЛОГОС при решении задач аэрогазодинамики старта и полета ракетносителей // *Математическое моделирование*. 2014. Т. 26, № 9. С. 83–95.

Deryugin Yu. N., Zhuchkov R. N., Zelen-skiy D. K., Kozelkov A. S., Sarazov A. V., Kudimov N. F., Lipnitskiy Yu. M., Panasen-ko A. V., Safronov A. V. Rezultaty valida-tsii mnogofunktionalnogo paketa programm LOGOS pri reshenii zadach aerogazodinamiki starta i poleta raket-nositeley // *Matema-ticheskoe modelirovanie*. 2014. T. 26, N 9. S. 83–95.

27. *Козелков А. С.* Методика численного мо-делирования цунами оползневого типа на

основе уравнений Навье—Стокса // *Вычис-лительная механика сплошных сред*. 2016. Т. 9, № 2. С. 218–236.

Kozelkov A. S. Metodika chislenogo modelirovaniya tsunami opolzneвого tipe na osnove uravneniy Navie-Stoksa // *Vychislitel-naya mekhanika sploshnykh sred*. 2016. T. 9, N 2. S. 218–236.

Статья поступила в редакцию 07.06.18.

NUMERICAL SIMULATION OF AERODYNAMIC PROBLEMS WITH STATIC ADAPTATION OF THE MESH FOR SPECIFIC FEATURES OF THE SOLUTION / A. V. Struchkov, A. S. Kozelkov, R. N. Zhuchkov, A. A. Utkina, A. V. Sarazov (FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov, N. Novgorod region).

The algorithm of numerical solution for aerodynamics problems based on the separation of the shockwave areas followed up by refining the mesh there using adaptively embedded meshes is described. The implemented method is based on the division of cells by adding new nodes on the face. Finding shockwave areas for adaptation is done using the criteria on the basis of the pressure gradient and density gradient. The proposed algorithm is realized on random non-structured meshes and aimed at finite-volume discretization of the system of Navier-Stokes equations. Implementation of the algorithm is shown with the problems of transonic airflow of the profile NACA0012 and supersonic airflow of a wedge. It is shown that implementation of the proposed method of adaptive meshes improves considerably the quality of the numerical solution produced at the coarse meshes.

Keywords: aerodynamics, numerical simulation, adaptive meshes, transonic and supersonic flow, shock waves.

УДК 519.6

ЭФФЕКТИВНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ВРЕМЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАДАНИЙ ПО РАСШИРЕННЫМ МЕТАДАННЫМ

С. А. Петунин
(ФГУП "ВНИИА им. Н. Л. Духова", г. Москва)

Проведено исследование применения статистического метода Random Forest, относящегося к группе машинного обучения, для прогнозирования временных показателей вычислительного задания: времени ожидания в очереди и времени выполнения. Все эксперименты проведены на данных большого объема менеджера ресурсов и планировщика заданий Slurm, накопленных им в журналах за различные календарные периоды. Программы обработки данных реализованы в виде скриптов в рамках статистической системы R. Принципиальной идеей работы явилось включение в структуру прогнозных моделей новых уникальных метаданных вычислительных заданий, не используемых ранее. Результаты исследований показали более чем удвоенную эффективность предложенных прогнозных моделей по сравнению с оценками пользователей и планировщика. Работа является первым шагом в проекте внедрения автоматических сервисов управления вычислительными заданиями на уровне метапланировщика в целях автоматизации запросов ресурсов, а также для более качественного оповещения пользователей.

Ключевые слова: прогнозирование, метаданные вычислительного задания, время выполнения, время ожидания, метод Random Forest.

Введение

Проведение регулярных массовых расчетов на высокопроизводительных вычислительных системах (ВВС) характеризуется высокой рабочей нагрузкой. Как следствие, это приводит к значительному времени нахождения в очередях запускаемых вычислительных заданий. Пользователи получают результаты расчетов позже ожидаемого времени, что негативно сказывается на сроках выполнения исследовательских и производственных проектов. Ситуацию не меняет даже постоянный рост производительности вводимых в эксплуатацию новых суперкомпьютеров, несмотря на доступные для заданий пользователей сотни или тысячи вычислительных узлов.

Наличие постоянных очередей в современных кластерах усугубляет известную проблему потери эффективности при попытках планировщика загружать все вычислительные узлы. Широкое вычислительное поле позволяет запускать множество многоузловых заданий. После этого в нем возникает дефрагментация с большой

площадью свободных, но не распределенных вычислительных ресурсов в пространстве выполняемых заданий $\langle \text{узлы}, \text{время} \rangle$. Их способно "запереть" одно приоритетное задание, ожидающее еще большего ресурса. Применение различных вариантов алгоритма *бэкфиллинга* — обратного заполнения очереди (приоритетного запуска малоресурсных заданий из хвоста очереди) — нельзя признать удовлетворительным для полного заполнения "дыр" и устранения дефрагментации. Проблема в том, что при постановке заданий в очередь пользователи дают приблизительную оценку времени их счета, которая передается планировщику. Малые оценочные значения помогают алгоритму быстрее запускать задания на счет. Однако статистика рабочей нагрузки почти всех суперкомпьютерных центров показывает сильное превышение запрошенного времени выполнения по сравнению с реальным [1]. Это объясняется нежеланием пользователя, чтобы его задание было принудительно снято по событию таймаута. Существенный разброс значений динамических характеристик метаданных

заданий в множестве их запусков также мешает пользователю выбрать подходящий прогноз продолжительности их выполнения.

Научная проблематика с предложениями по оптимизации выделения ресурсов была активно и полно обсуждена еще в начальный период параллельных вычислений [2]. Алгоритм планирования параллельных заданий на базе бэкфиллинга стал популярен, начиная со второй половины 1990-х гг., после его описания в сборнике статей под редакцией профессора Д. Фейтельсона [3]. В последние годы резко увеличилось количество публикаций в этой области в связи с привлечением современных интеллектуальных методов статистического машинного и глубокого обучения (ML — Machine Learning, DP — Deep Learning) для решения задачи повышения эффективности выделения ресурсов ВВС. Актуальность поиска новых методик частично связана с резким ростом количества узлов в современных кластерах петафлопсного класса. При этом потери от незаполнения свободных узлов, достигающие до нескольких процентов годовой недогрузки, могут быть эквивалентны простоя целого кластера средней производительности. В некоторых работах, касающихся проблемы улучшения оценок временных фаз вычислительного задания — времени ожидания и времени выполнения — с помощью интеллектуальных методов, получены значительные результаты [4–6].

Принципиальной идеей данной работы, расширяющей ранее известные методы, является использование дополнительных метаданных вычислительных заданий, обучаемых на статистических данных планировщика и менеджера ресурсов Slurm [7], для прогнозирования временных показателей рабочей нагрузки. Предложенные модели направлены на решение нескольких практических задач. Первая задача связана с оповещением пользователей в онлайн-режиме достоверными прогнозными данными по вычислительным заданиям. Вторая задача предполагает построение и внедрение полуавтоматической пилотной очереди, управляемой планировщиком, который формирует собственные "безопасные" значения времени выполнения запускаемых заданий, отталкиваясь от истории запусков приложений.

В данной статье:

- 1) на выборочных данных большого объема проведен анализ статистики планировщика;

- 2) предложены группы моделей метаданных с расширенной идентификацией приложений;
- 3) приведено описание экспериментов по определению качества моделей и их применимости.

Используемая в исследовании статистика получена из журналов Slurm при проведении массовых расчетов на одном из кластеров ВНИИА в течение трех различных календарных периодов: осень 2017 г. (3 месяца), весна—лето 2018 г. (3 месяца), лето—осень 2018 г. (4 месяца).

1. Анализ фаз обработки вычислительных заданий

1.1. Ошибки оценок пользователей.

В структуре рабочей нагрузки вычислительных кластеров принципиальную роль играют две временные характеристики, составляющие фазы ожидания и выполнения заданий пользователей. Еще одна временная характеристика, которая используется в данном исследовании, задается пользователем в качестве запрашиваемой максимальной квоты времени выполнения задания. Для описания моделей, предлагаемых в следующем разделе, обозначим эти переменные соответственно *Twait*, *Trun* и *Tlimit*. Еще одну переменную, характеризующую долю "угадывания" пользователем длительности задания — отношение *Trun/Tlimit*, обозначим как *Kwall-time*. Малые значения этого коэффициента свидетельствуют о завышенных значениях *Tlimit*, которые при бэкфиллинге, как известно, должны негативно влиять на длительность *Twait*. Действительно, для объединенного набора данных из статистики трехмесячных периодов расчетов 2017–2018 гг. коррелограмма (рис. 1)* имеет большой угол наклона регрессионной линии и значение коэффициента корреляции Пирсона $r = 0,53$, что соответствует средней степени зависимости, так как попадает в интервал (0,3; 0,7). В качестве аргумента на графике выступает "площадь" задания, т. е. произведение заказанных пользователем узлов (*nodes*) и прогно-

* На рис. 1 и 3 шкалы графиков прологарифмированы, чтобы показать наглядную качественную картину распределений со значительной долей малых значений в данных. Количественные метки на осях соответствуют не реальным, а некоторым условным метрикам значений визуализируемых переменных. На других графиках также могут использоваться условные обозначения.

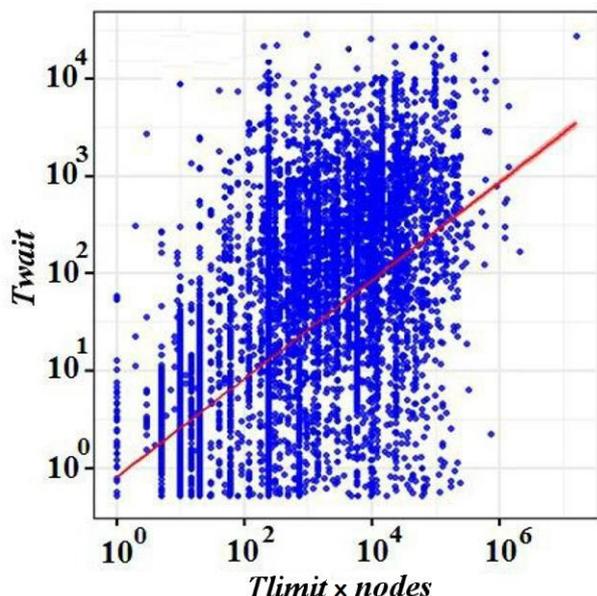


Рис. 1. Влияние запрашиваемых ресурсов на время ожидания, $r = 0,53$

за времени выполнения. Это подтверждает важность задачи оптимизации переменной *Tlimit*.

Особенно важна точность прогноза пользователя по *Tlimit* для коротких по времени запусков заданий, так как именно они помогают заполнять небольшие пустоты в вычислительном пространстве из распределенных и свободных ресурсов. Однако для этих заданий коэффициент *Kwall-time*, как правило, имеет очень низкие значения. Это демонстрирует рис. 2, где анализируется тот же набор данных, что и на рис. 1. Ордината (функция распределения CDF) показывает процент накопления упорядоченных значений коэффициента. Данные разбиты на два класса по порогу процессорного времени:

- длинные задания — размером больше 15 узло-минут;
- короткие задания — размером не больше 15 узло-минут.

Граничное значение в этой укрупненной метрике соответствует процессорному времени $15 \times 16 \times 60 = 14\,400$ процессорных секунд, так как данная статистика собрана для 16-ядерных узлов.

На рис. 2 наблюдается "ступенька" у кумулятивной функции распределения для немалого процента длинных заданий с *Kwall-time*, равным 1 (правые верхние части графиков). К сожалению, эта статистика свидетельствует не о проницательности пользователей, а, скорее, наоборот, — нежелании заботиться о точной оценке времени своих расчетов. Все эти задания сня-

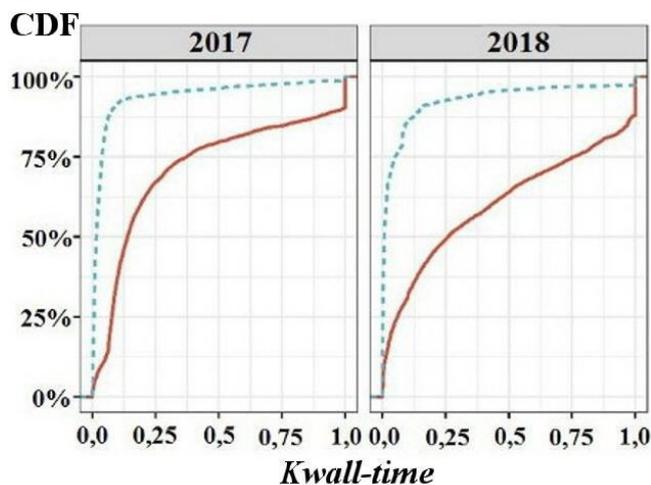


Рис. 2. Распределение времени выполнения заданий: — — длинные задания; - - - — короткие задания

ты системой по событию таймаута. Длительный итерационный процесс моделирования по ряду методик позволяет пользователю получать и периодически сбрасывать на диск результаты приемлемой точности задолго до снятия задания системой. Таймаут является перестраховочным способом прекращения выполнения итераций счета.

Тот факт, что к указанному классу относятся более длительные задания, чем те, которые сняты по нормальному коду завершения, иллюстрирует рис. 3. Диаграмма демонстрирует диапазон распределения значений *Tlimit* с высоким уровнем медианы для группы заданий с кодом таймаута.

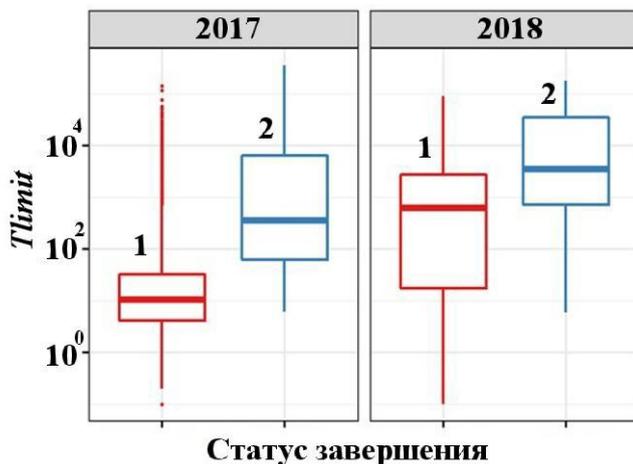


Рис. 3. Диаграмма диапазонов значений *Tlimit* по годам для двух классов заданий: 1 — с нормальным кодом завершения; 2 — завершённых по таймауту

1.2. Ошибки оценок планировщика. Задача корректировки значений T_{limit} связана с прогнозированием времени нахождения в очереди T_{wait} . Пользователь должен знать предполагаемый момент получения доступа к вычислительному ресурсу. Планировщик Slurm выдает эту информацию. Однако его оценка достаточно грубая, так как базируется на простой функции от значений T_{limit} тех заданий, которые находятся в фазе ожидания в конкретном вычислительном разделе. Завышенные значения пользователей, как правило, приводят к пессимистическому прогнозу планировщика относительно времен старта заданий. Это подтверждают полученные при мониторинге трасс заданий кластера ВНИИА выборки, которые дополнены значениями прогноза времени запуска. Например, на такой выборке из 8 тыс. заданий (рис. 4) демонстрируется следующая статистика:

- не определено планировщиком 54 % заданий;
- находится в зоне переоценки 93 % от определенных;
- средняя ошибка на одно задание — 8 часов;
- суммарная ошибка — 42 условных суток.

Рис. 4 показывает значительно большую площадь под линией отклонения (ошибок) прогнозных значений T_{pred} от реальных T_{start} в положительной зоне графика (зона переоценки).

Несмотря на попытки планировщика периодически корректировать прогнозное время при присутствии задания в очереди, это не всегда улучшает суммарное отклонение. По метрике

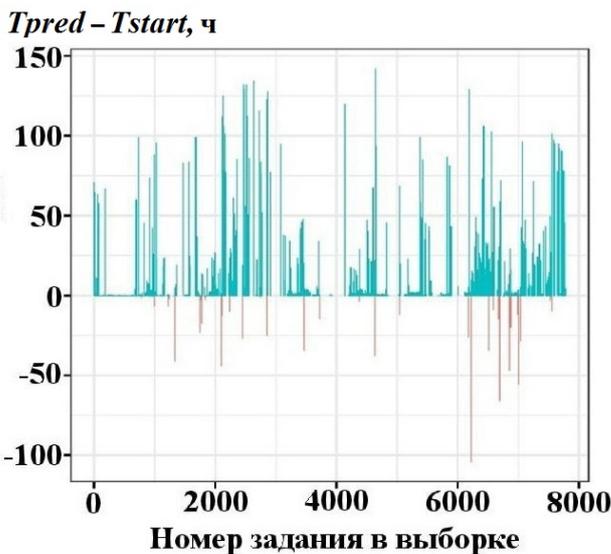


Рис. 4. Оценка Slurm времени запуска

средней абсолютной ошибки предстартовый прогноз для взятого набора данных только увеличил ошибку начального прогноза с 42 до 60 условных суток. На рис. 5 (см. также цветную вкладку) представлена трасса трех заданий, находившихся в состояниях ожидания и выполнения в течение 2 сут. Пунктирными цветными линиями обозначены фазы ожидания, сплошной черной — фазы выполнения. Цветные точки на вертикали показывают два прогнозных времени планировщика (T_{pred}) — первое и последнее, перед запуском, а черные точки соответствуют определенному системой мониторинга (1 раз в 5 мин) времени перехода задания в состояние выполнения (T_{actual}). Заметим, что у задания 35 513 начальный прогноз оказался лучше предстартового. У задания 35 521 предстартовый прогноз оказался точным, но в течение основного времени ожидания планировщик ошибался на 2 сут.

Описанный анализ журнальных файлов менеджера и планировщика заданий Slurm показал и подтвердил важность уточнения оценок двух временных характеристик вычислительных заданий: времени выполнения и времени ожидания.

2. Модели на основе расширения метаданных заданий

Рассмотрим две группы из четырех моделей метаданных M0, M1, M2, M3 для обучения па-

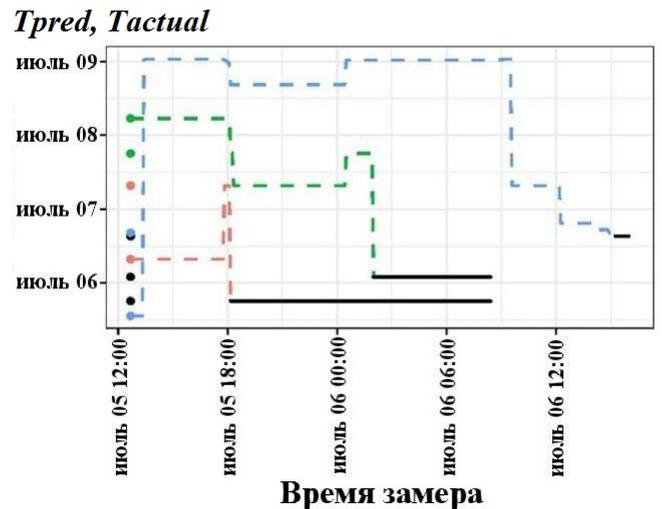


Рис. 5. Неэффективность корректировки Slurm прогноза времени запуска: ●, --- — задание 35 513; ●, --- — задание 35 520; ●, --- — задание 35 521

раметров-откликов при прогнозировании времен выполнения и ожидания заданий (табл. 1). Переменная отклика задает тип модели. Для непрерывных величин *Trun* и *Twait* прогнозная модель относится к типу регрессионной. Для двух других откликов, которые являются категориальными переменными, модель становится классификационной. Наборы предикторов для двух групп моделей совпадают, за исключением небольших отличий. Внутри группы каждая следующая модель содержит в себе предикторы предыдущей, расширяя их набор новыми метаданными.

Заметим, что только малая часть предикторов в явном виде содержится в типовых журналах Slurm. Модели 2 и 3 содержат метаданные, предложенные автором для увеличения количества

предикторов (в табл. 1 они выделены серым фоном), которые формируются дополнительно, но также на основе статистики планировщика. Значения календарных параметров, которые, как ожидается, должны улучшать качество моделей, вычисляются по дате постановки задания в очередь раздела. Существенная часть предикторов идентифицирует приложение, по которому проводится расчет. Например, кортеж $\langle project, program, area, task, param \rangle$ является паспортом задания. С его помощью пользователь сохраняет в базе данных Slurm важную информацию о выполняемом приложении. Кортеж задается в атрибуте *comment* пакетного вызова. Если раньше эти дополнительные поля служили для анализа статистики запусков заданий [8], то в данной работе их предлагается использовать для

Таблица 1

Отклики и предикторы моделей из метаданных заданий

Параметр	Характеристика	Модель <i>Trun</i>				Модель <i>Twait</i>			
		M0R	M1R	M2R	M3R	M0W	M1W	M2W	M3W
Отклики									
<i>Trun</i>	<i>t</i> выполнения	+	+	+	+				
<i>Twait</i>	<i>t</i> ожидания					+	+	+	+
<i>class Trun</i>	класс <i>t</i> выполнения	+	+	+	+				
<i>class Twait</i>	класс <i>t</i> ожидания					+	+	+	+
Предикторы									
<i>Tlimit</i>	запрос <i>t</i> выполнения	+	+	+	+	+	+	+	+
<i>Twait</i>	<i>t</i> ожидания		+	+	+				
<i>nodes</i>	кол-во узлов	+	+	+	+	+	+	+	+
<i>part</i>	раздел		+	+	+		+	+	+
<i>reserv</i>	резервация		+	+	+		+	+	+
<i>nuser</i>	пользователь		+	+	+		+	+	+
<i>nbat</i>	файл запуска		+	+	+		+	+	+
<i>nworkdir</i>	рабочая директория			+	+			+	+
<i>project</i>	проект			+	+			+	+
<i>program</i>	код приложения			+	+			+	+
<i>area</i>	область моделирования			+	+			+	+
<i>task</i>	задача			+	+			+	+
<i>param</i>	расчетная модель			+	+			+	+
<i>mon</i>	месяц				+				+
<i>hod</i>	час дня				+				+
<i>dow</i>	день недели				+				+
<i>pod</i>	утро/день/вечер				+				+
<i>nalloc</i>	занятые узлы				+				+
<i>nque</i>	длина очереди				+				+
<i>Twait1</i>	<i>t</i> ожидания (Slurm)								+

улучшения качества моделей. Некоторые поля категориального типа, например имя пользователя, меняются на порядковые номера значений категориальной переменной, так как большое количество категорий ухудшает качество прогнозных моделей.

Объясним идею вложенности моделей.

Модель 0 (M0R, M0W) является тривиальной и базируется только на предикторе T_{limit} .

Модель 1 (M1R, M1W) опирается на типовые предикторы, с помощью которых обычно проводятся исследования рабочей нагрузки параллельных заданий (формат swf — standart workload format) [9]. Эта статистика, собранная в некоторых зарубежных суперкомпьютерных центрах, доступна через Интернет [10]. К сожалению, swf-архивы содержат информацию о рабочей нагрузке суперкомпьютеров прошлого века, когда ее структура была принципиально другой. Поэтому валидацию методик и моделей на основании данных этих архивов нельзя считать обоснованной. Модель 1 можно рассматривать как базовый вариант.

Модель 2 (M2R, M2W) принципиально расширяет метаданные заданий, характеризуя специфику запускаемых приложений. Именно дополнительные параметры должны повышать точность модели. Применение расширенной идентификации заданий — важная концепция данной работы. Таким образом осуществляется переход от парадигмы обезличенного вычислительного задания, запускаемого конкретным пользователем, к понятию вычислительного приложения как группы расчетов, которое обладает устойчивыми ресурсными характеристиками.

Модель 3 (M3R, M3W) дополняет предикторы календарными признаками, а в случае моделирования времени ожидания — еще и состоянием раздела (количество распределенных узлов и длина очереди). Важной идеей является разбиение календарного времени на несколько категориальных значений: час и период суток, день недели и т. д., что должно помогать при классификационном разбиении.

Моделирование будем проводить методом машинного обучения Random Forest (RF — случайный лес) [11], который является одним из немногих универсальных алгоритмов и хорошо зарекомендовал себя на разнородных наборах с числовыми и категориальными данными. Алгоритм устойчив к выбросам значений. Кроме того, он имеет высокую скорость обучения и способность обрабатывать большие объемы данных. Все эти

качества подходят для анализа суперкомпьютерной рабочей нагрузки. Подбор оптимального метода из "большой тройки" эффективных ML-методик — опорных векторов, решающих деревьев или градиентного бустинга, которые могут показывать близкие результаты по качеству прогнозов в зависимости от конкретного набора данных, целью не являлся.

3. Условия проведения экспериментов

3.1. Исходные данные и программное обеспечение. Для проведения обучения была отобрана генеральная выборка периодов осень—зима 2017 г. и весна—лето—осень 2018 г. статистики вычислительных заданий кластера средней производительности с высокой рабочей нагрузкой. При сборе данных принципиально не использовались специальные мониторинговые системы, чтобы показать самодостаточность информации журналов, собираемых Slurm. Основные данные были выгружены командой `sacct`. Дополнительные данные для моделей получены при периодическом мониторинге состояния узлов кластера и очереди с помощью команд `squeue` и `sinfo`, запускаемых через сервис `cron`. Из генеральной выборки сформированы две группы данных с количеством 5, 10 и 50 тыс. записей, чтобы тестировать поведение моделей при изменении размера выборки. Обучающая выборка согласно стандартной методике содержала 70 % всех наблюдений, контрольная тестовая — 30 %.

Программные скрипты реализованы в рамках использования инструментов статистической экосистемы на языке R [13]. Набор скриптов включен в состав разработанной автором в 2014—2015 гг. интерактивной системы анализа "Антик" [14]. В проведенном исследовании использовалась версия метода RF из пакета `randomForest`, доступная на CRAN-репозитории системы R. Так как RF относится к типу машинного обучения, базирующемуся на ансамблях решающих деревьев, в методике необходимо задавать параметр количества деревьев в ансамбле. Было выбрано значение 100, которое обычно используется в случае исследований, не связанных с масштабированием этого параметра, и которое в рассматриваемом случае обеспечило порог, после которого ошибки моделей уже не уменьшаются.

3.2. Метрики оценки качества. Для диагностики изменения качества моделей при варьировании наборов метаданных заданий будем применять наиболее рекомендуемые метрики для регрессионных и классифицирующих моделей:

1. Корень из среднеквадратической ошибки

$$\text{RMSE} = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n (t_i^a - t_i^{\text{pred}})^2},$$

где n — количество заданий в выборке; t_i^a — актуальное значение временного отклика; t_i^{pred} — предсказанное моделью значение.

2. Средняя абсолютная ошибка

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| t_i^a - t_i^{\text{pred}} \right|.$$

3. Точность (*accuracy*) — процент (доля) прогнозных значений отклика, классифицированных правильно. Другие, более информативные критерии эффективности классификаторов (полнота, специфичность и др.) [12] в работе не используются, так как применяются к классу бинарных классификаторов или к каждому классу в отдельности.
4. Важность предикторов. Метод RF позволяет оценивать роль предикторов в обеспечении качества классификатора, что информативно при отборе различных метаданных и сокращении размерности модели.

Регрессионные метрики целесообразно применять и для оценки классификаторов, когда номера классов не кодируются как значения категориальной переменной, так как они упорядочены по возрастанию числовых значений откликов, относящихся к смежным классам.

4. Исследование моделей

4.1. Модель *Trun*. Сначала проанализируем поведение моделей M0R, M1R, M2R, M3R на регрессионной схеме прогнозирования значения непрерывного времени выполнения заданий. Так как абсолютные значения оценочных метрик при секундном масштабе отклика *Trun* являются большими числами и малоинформативны, предлагается рассматривать отношение прогнозных значений пользователя *Tlimit* к прогнозным значениям модели. Это отношение k показывает, во сколько раз модель точнее человеческого предсказания. В табл. 2 наблюдаются похожие простоты улучшения качества прогноза для разных размеров выборок. Метрика RMSE считается наиболее важным критерием для оценки прогнозирования значений непрерывных переменных. Она дает более чем трехкратное улучшение на последней модели. Из табл. 2 также видна монотонность изменения значений. Дополнительно функции распределения на рис. 6 иллюстрируют существенную разницу близости с реальным временем модельной оценки по сравнению с оценкой *Tlimit*. В визуализируемом наборе отфильтрованы малые времена, на которых все графики визуально близки, а также несколько больших "выбросов".

Перейдем к классификационной схеме прогнозирования. Ее целесообразно использовать в случае автоматической безопасной замены прогноза пользователя на порядковый номер класса. Прогнозировать значение непрерывного времени выполнения не имеет большого практического смысла, важнее определить границы подходящего класса и выбрать его верхнее значение для замены прогноза, предлагаемого пользователем.

Шесть классов для отклика *Trun* в рамках конкретной выборки сформируем следующим образом:

Таблица 2

Улучшение качества регрессионных моделей при расширении метаданных (2018 г.)

Размер выборки	Тип коэффициента	Модель метаданных				
		$Tlimit$	M0R	M1R	M2R	M3R
5 тыс.	$k(\text{RMSE})$	1	2,48	2,73	3,09	3,27
	$k(\text{MAE})$	1	2,87	3,05	3,93	4,11
10 тыс.	$k(\text{RMSE})$	1	2,60	2,86	3,14	3,23
	$k(\text{MAE})$	1	3,00	3,16	3,97	4,22
50 тыс.	$k(\text{RMSE})$	1	2,97	3,49	3,61	3,75
	$k(\text{MAE})$	1	3,42	5,09	5,55	5,78

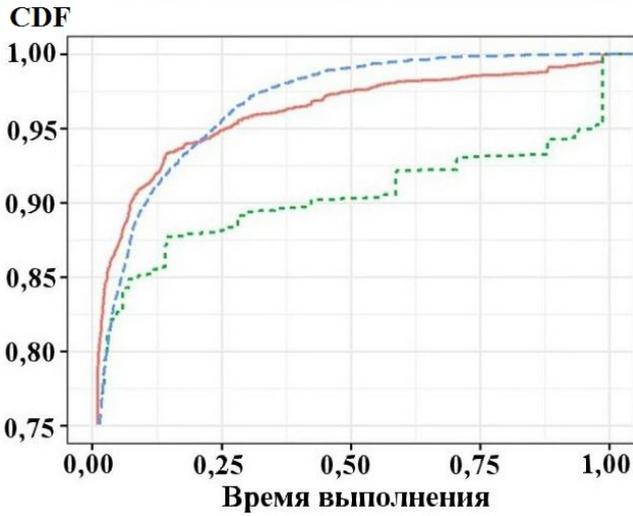


Рис. 6. Сравнение близости распределений прогнозов M3R (---) и T_{limit} (···) с реальным временем (—)

- 1) разобьем шкалу времени на два сегмента: задания, выполнявшиеся менее и более часа;
- 2) внутри каждого сегмента проведем группировку значений $Trun$ в три кластера по методу k-means [13].

Подобное динамическое разбиение границ кластеров для определения классов отклика по сравнению с фиксированно заданными границами позволяет учитывать частотность и структуру распределения параметра $Trun$. Наличие тестовых методических заданий с коротким временем выполнения, а также производственных методик типа Bag-of-Tasks (BoT), когда запускается большое количество коротких заданий (в частности, в области молекулярно-динамического моделирования), обосновывает

специальное выделение первого сегмента. В табл. 3 приведены данные о качестве классификатора, построенного по прежним метрикам с добавлением метрики точности попадания в требуемый класс. При вычислении формул ошибок используются абсолютные (числовые) порядковые значения классов. В связи с тем, что категории классов упорядочены по возрастанию значений переменной, регрессионные метрики можно использовать как классификационные. Чисто классификационная метрика *accuracy* показывает долю правильно определенных классов. В модели 3 для различных выборок ее значение составляет чуть менее 90%. Здесь также наблюдается монотонность результатов обучения по всем критериям.

Приведенные в таблице результаты соответствуют случайным, но типовым "усредненным" по структуре выборкам. Большое количество проведенных экспериментов показало зависимость качества оценок от процента BoT-приложений в структуре выборок. При исключении этой группы запусков из анализа прогноз ухудшается. И наоборот, он улучшается, когда задания данной группы составляют большинство. Итоговый разброс значений метрики *accuracy* определен в интервале между 70 и 96%.

4.2. Модель Twait. В подразд. 1.2 был приведен пример ошибок планировщика Slurm в оценке времени ожидания заданий в очереди. Для получения этой информации пришлось запускать процедуру мониторинга состояния очереди. В набор таких заданий попадали те, которые ожидали в очередях более 3 мин. Для сформированного набора из 8 тыс. заданий получены оценки прогнозирования значений $Twait$ плани-

Таблица 3

Оценка качества прогноза для $Trun$ -модели с классами

Размер выборки	Метрика	Модель метаданных			
		M0R	M1R	M2R	M3R
5 тыс.	RMSE	0,871	0,699	0,698	0,677
	MAE	0,312	0,212	0,207	0,200
	<i>accuracy</i>	0,836	0,879	0,886	0,887
10 тыс.	RMSE	0,726	0,524	0,523	0,511
	MAE	0,361	0,175	0,172	0,157
	<i>accuracy</i>	0,716	0,866	0,870	0,884
50 тыс.	RMSE	0,678	0,589	0,564	0,551
	MAE	0,288	0,209	0,194	0,187
	<i>accuracy</i>	0,780	0,845	0,854	0,859

ровщиком и с использованием моделей по регрессионной схеме (табл. 4). В этом примере модели метода RF в несколько раз превосходят по качеству оценку, сделанную планировщиком. Дополнительно функции распределения на рис. 7 иллюстрируют существенную разницу близости с реальным временем модельной оценки по сравнению с оценкой Slurm.

Как и для *Trun*-моделей, в табл. 5 приведен пример улучшения качества прогноза для классификационных моделей на выборке размером в 10 тыс. записей периода весна—лето 2018 г.

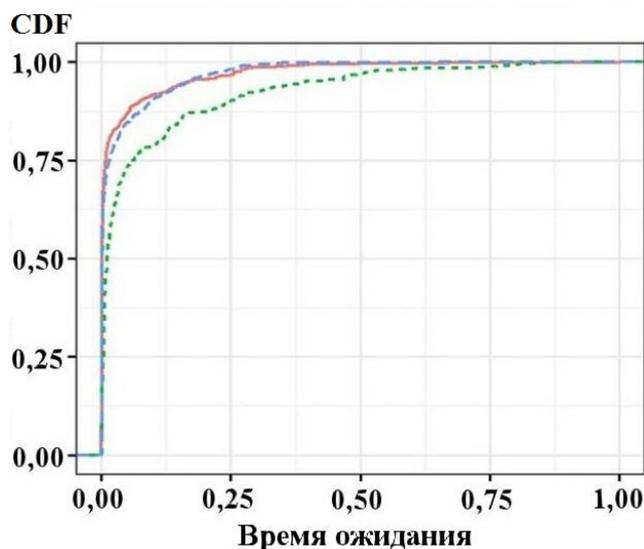


Рис. 7. Сравнение близости распределений прогнозов M3W (---) и Slurm (···) с реальным временем (—)

Монотонность у *Twait*-моделей при расширении метаданных сохраняется, при этом она еще более выражена по сравнению с *Trun*-моделями (рис. 8). Ошибки уменьшаются быстрее, точность растет соответственно.

4.3. Важность влияния предикторов.

Метод RF позволяет учитывать важность вклада переменных-предикторов в эффективность модели. Для оценки используются две специальные метрики. Первая определяет результаты перестановки значений в предикторе, т. е. уменьшения точности модели. Вторая метрика определяет результат уменьшения показателя разнородности Джини (энтропии). На рис. 9 показан пример ранжирования предикторов M3W по этим двум критериям для самой большой многомесячной выборки в 50 тыс. заданий.

Как и предполагалось, в прогнозе времени ожидания, кроме запрашиваемых ресурсов (*Tlimit*, *nodes*), корреляция с которыми показана на рис. 1, важную роль по первому критерию играют календарные параметры (*dow*, *hod*, *mon* и др.). Также среди наиболее важных параметров фигурируют данные паспорта заданий (*project*, *area*, *program* и др.). В верхней части списка также присутствуют введенные в модель 3 данные о состоянии загруженности кластера (*nalloc*, *nque*). Этот пример подтверждает правильность идеи включения расширенных метаданных в состав моделей.

Еще одно предложение заключается в применении прогноза Slurm в дополнение к ал-

Таблица 4

Улучшение качества прогноза Slurm с использованием *Twait*-моделей

Размер выборки	Тип коэффициента	Модель метаданных				
		Slurm	M0W	M1W	M2W	M3W
8 тыс.	k (RMSE)	1	1,83	2,39	2,42	2,86
	k (MAE)	1	2,48	2,87	2,99	4,02

Таблица 5

Оценки качества прогноза для *Twait*-моделей с классами

Размер выборки	Метрика	Модель метаданных			
		M0W	M1W	M2W	M3W
10 тыс.	RMSE	0,877	0,767	0,692	0,494
	MAE	0,436	0,387	0,314	0,146
	<i>accuracy</i>	0,674	0,689	0,746	0,889

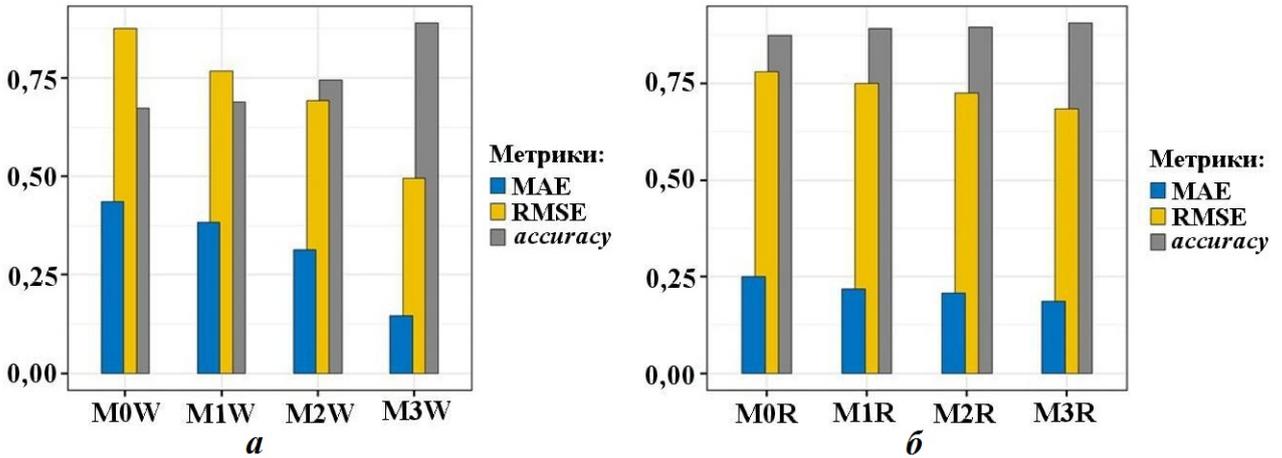


Рис. 8. Сравнение монотонности обучения *Twait*- (а) и *Trun*-моделей (б) (выборка в 10 тыс. записей, 2018 г.)

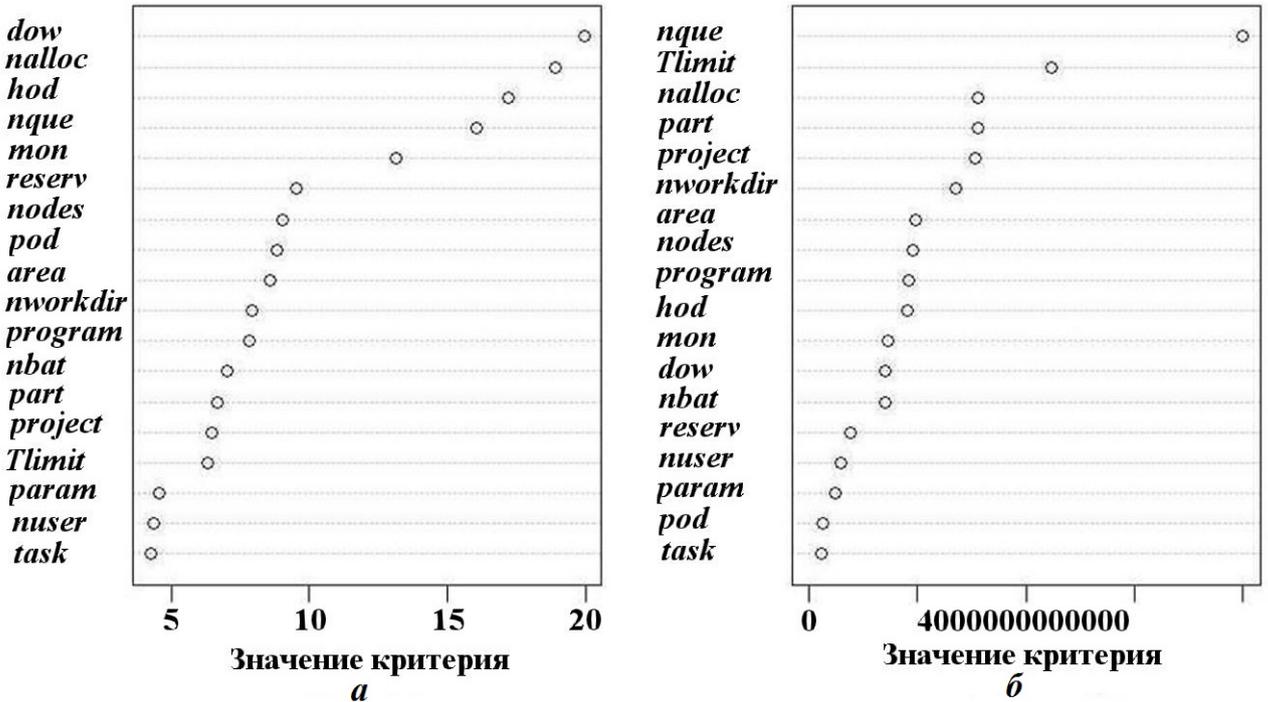


Рис. 9. Важность предикторов для модели M3W: а — критерий точности; б — критерий Джини

горитму RF. Несмотря на неточность оценки планировщика, в роли предиктора модели (см. последний параметр табл. 1) он получает первое место в рейтинге важности по обоим критериям, существенно повышая качество прогнозирования. Для набора данных в 8 тыс. заданий это улучшение составило 6% для RMSE и 12% для MAE.

4.4. Влияние параметров при обучении.

Алгоритм RF не обладает множеством параметров для его настройки на конкретный набор данных в процессе обучения модели. Принципи-

альным параметром является количество деревьев в ансамбле — параметр *n_{tree}*. Проведенные эксперименты показали, что во всех случаях ошибка перестает уменьшаться после *n_{tree}* > 100. При этом для моделей *Twait* резкое уменьшение ошибки происходит уже в интервале [20,40] (рис. 10), а для моделей *Trun* порогом является *n_{tree}* = 50. Следовательно, при встраивании алгоритма в систему планирования заданий скрипт построения модели будет выполняться быстрее, если для параметра будет выбрано уменьшенное значение. Модель M3W демонстрирует более чем двукратное улучшение.

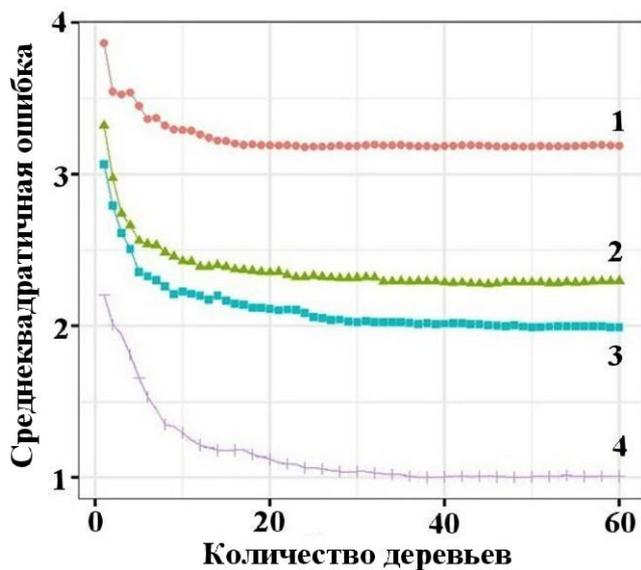


Рис. 10. Зависимость ошибки от количества деревьев в ансамбле для *Twait*-моделей: 1 — M0W; 2 — M1W; 3 — M2W; 4 — M3W

Другим параметром, влияющим на качество оценки прогнозирования, является размер выборки. Применим следующую схему масштабирования. Интервал периода рабочей нагрузки будем увеличивать при движении назад от текущего последнего времени замера в генеральной выборке 2018 г. с шагом в 5 тыс. заданий. Рис. 11 иллюстрирует увеличение прогнозной ошибки для всех моделей при размере выборки в интервале 20–30 тыс. заданий. Однако с дальнейшим увеличением размера возникает монотонное улучшение качества регрессионного прогнозирования как для простых, так и многопредикторных наборов метаданных. Таким образом, при реальном выполнении прогнозного скрипта в системе оповещения пользователей для него необходимо выбирать оптимальные размеры набора данных, полученные при предварительном исследовании влияния масштабирования.

5. Две задачи внедрения результатов исследования

Полученные выше результаты позволяют перейти к практической фазе включения моделей в окружение планировщика. На первом этапе предполагается решение двух задач, сформулированных во Введении.

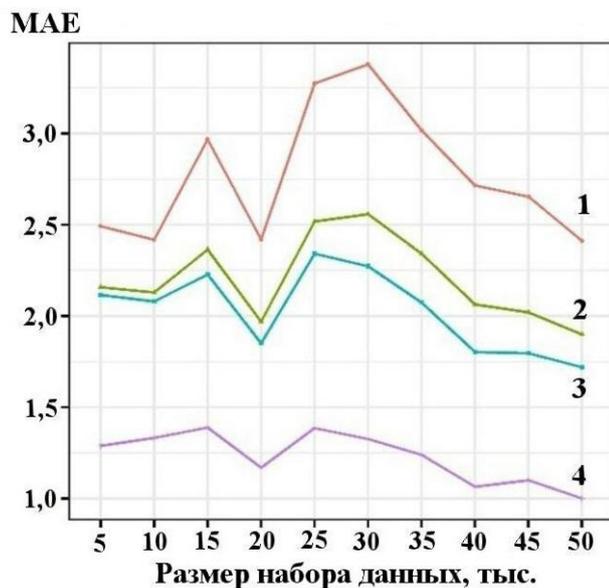


Рис. 11. Зависимость ошибки от размера выборки для *Twait*-моделей: 1 — M0W; 2 — M1W; 3 — M2W; 4 — M3W

Первый проект предполагает разработку команды-утилиты для пользователей, стремящихся получать более достоверную информацию об обработке своих заданий, находящихся в очередях вычислительного кластера. Интерфейс команды прост: на входе задается *JobID* — идентификатор задания в стадии ожидания, на выходе пользователь получает две временные оценки — предполагаемое календарное время запуска задания и прогнозное значение длительности его выполнения после запуска.

Схема реализации взаимодействия Slurm и блока прогнозирования следующая:

- 1) при постановке любого задания в очередь планировщик совместно со стандартным парсингом опций пакетных команд `sbatch` выполняет расширенные функции по формированию 20 метаданных (см. табл. 1) запускаемого задания и сохранению этой записи во внутренней базе данных. Часть кода подобного расширения уже включена в текущую версию планировщика для обеспечения синтаксического анализа полей паспорта задания;
- 2) R-скрипт построения моделей M3W и M3R запускается через механизм `cron` по выбранному расписанию: раз в час или реже, чтобы актуализировать модели с учетом последних завершенных заданий. Глубина данных статистики является параметром скрипта;

3) по запросу пользователя из базы планировщика выбирается вектор метаданных запрашиваемого задания, загружается ранее построенная текущая модель и осуществляется прогнозирование двух единичных откликов, которые визуализируются в консольном окне пользователя.

При реализации второго проекта схема несколько меняется: шаг 3 схемы запускается сразу после шага 1 самим планировщиком для прогнозирования по модели МЗР и замены пользовательского значения *Tlimit* на значенные вычисленного отклика. Таким образом, второй расширенный проект предусматривает для нового высокопроизводительного кластера ВНИИА внедрение экспериментальной пилотной очереди, управляемой планировщиком, который формирует собственные оптимальные "безопасные" значения времени выполнения запускаемых заданий, отталкиваясь от истории запуска приложений на основе прогнозных моделей. Наличие нового кластера для проекта вызвано также технической проблемой отладки алгоритмов интеграции. К сожалению, безболезненная интеграция Slurm и блока моделирования требует наличия испытательных стендов и практически невозможна на работающем высоко загруженном кластере, так как затрагивает самый важный и чувствительный элемент управления кластером — систему управления вычислительными заданиями.

Выводы

Проведенное исследование продемонстрировало способность методик машинного обучения к эффективному прогнозированию важнейших показателей рабочей нагрузки, связанных с временными характеристиками обработки вычислительных заданий. Получены следующие результаты:

1. На значительной (по времени и объему данных) статистике показана существенная неточность прогнозирования в оценках пользователей и планировщика заданий.
2. Предложены новые группы метаданных вычислительных заданий для построения прогнозов их временных характеристик на базе метода машинного обучения RF.
3. Показана эффективность предложенных моделей: качество оценок для любых выборок данных по сравнению с оценками поль-

зователей и планировщика Slurm лучше в несколько раз.

4. В процессе обучения выявлены зависимости качества оценок от расширения типов предикторов, параметров самой методики и структуры рабочей нагрузки (в частности, установлено существенное улучшение прогноза при наличии большого процента заданий типа *BoT*).
5. Коды разработанных скриптов включены в состав системы статистического анализа "Антик" [14] (разработка ВНИИА).

Осуществляемое в настоящий момент внедрение описанных интеллектуальных методов для управления вычислительными заданиями кластеров ВНИИА позволит собрать материал для анализа повышения эффективности загрузки их вычислительных ресурсов. Предполагается провести сравнение результативности работы планировщика в штатном и прогнозном режимах на реальных данных массовых расчетов и опубликовать результаты этого сравнения.

Список литературы

1. *Muhalem A., Feitelson.* Utilization, predictability, workloads, and user runtime estimates in scheduling the IBM SP2 with backfilling // *IEEE Trans. Parallel Distrib. Syst.* 2001. Vol. 12(6). P. 529–543.
2. *Smith W., Foster I., Taylor V.* Predicting application run times using historical information // *Job Scheduling Strategies for Parallel Processing. Lect. Notes Comp. Sci.* 1998. P. 122–142.
3. *Skovira J., Chan W., Zhou H., Lifka D.* The EASY — LoadLeveler API project // *Ibid.* 1996. Vol. 1162. P. 41–47.
4. *Park J.-W., Kim E.* Runtime prediction of parallel applications with workload-aware clustering // *J. Supercomputing.* 2017. Vol. 73. P. 4635–4651.
5. *Soysal M., Bergho M., Streit A.* Analysis of job metadata for enhanced wall time prediction // *Job Scheduling Strategies for Parallel Processing. Lect. Notes Comp. Sci.* 2018. Vol. 11332. P. 1–14.

6. *Klusacek D., Chlumsky V.* Evaluating the impact of soft walltimes on job scheduling performance // *Job Scheduling Strategies for Parallel Processing. Lect. Notes Comp. Sci.* 2018. Vol. 11332. P. 15–38.
7. *Yoo A. B., Jette M. A., Grondona M.* SLURM: Simple Linux utility for resource management // *Job Scheduling Strategies for Parallel Processing. Lect. Notes Comp. Sci.* 2003. Vol. 2862. P. 44–60.
8. *Петунин С. А.* Методика начального анализа рабочей нагрузки вычислительных кластеров // *Тр. 4-й Межд. науч. конф. "Информационные технологии и системы (ИТиС)". Челябинск: Челябинский гос. университет, 2015. С. 129–130.*
Petunin S. A. Metodika nachalnogo analiza rabochey nagruzki vychislitelnykh klasterov // *Tr. 4-oy Mezhd. Nauch. Konf. "Informatcionnye tekhnologii i sistemy (ITiS)". Chelyabinsk: Chelyabinskiy gos. universitet, 2015. S. 129–130.*
9. *Feitelson D. G.* Parallel Workloads Archive. <http://www.cs.huji.ac.il/labs/parallel/workload>.
10. *Chapin S. J., Cirne W., Feitelson D. G., Jones J. P., Leutenegger S. T., Schwiegelshohn U., Smith W., Talby D.* Benchmarks and standards for the evaluation of parallel job schedulers // *Job Scheduling Strategies for Parallel Processing. Lect. Notes Comp. Sci.* 1999. Vol. 1659. P. 67–90.
11. *Груздев А. В.* Прогнозное моделирование в IBM SPSS Statistics, R и Python: метод деревьев решений и случайный лес. М.: ДМК Пресс, 2018.
Gruzdev A. V. Prognoznoye modelirovanie v IBM SPSS Statistics, R i Python: metod derevev resheniy i sluchayny les. M.: DMK Press, 2018.
12. *Джеймс Г., Уиттон Д.* Введение в статистическое обучение с примерами на языке R. М.: ДМК Пресс, 2016.
Dzheymys G., Uytton D. Vvedenie v statisticheskoe obuchenie s primerami na yazyke R. M.: DMK Press, 2016.
13. Официальный сайт R-проекта. <http://www.r-project.org>.
Ofitsialny sayt R-proekta. <http://www.r-project.org>.
14. *Petunin S. A., Vorontsov A. G.* The use of the historical job data scheduler to analyze high performance computing applications // *Proc. 19th Workshop on Computer Science and Information Technologies CSIT'2017. Germany, Baden-Baden, 2017. P. 164–167.*

Статья поступила в редакцию 17.12.18.

EFFICIENT JOB TIMING DATA PREDICTION BASED ON EXTENDED METADATA / S. A. Petunin (FSUE "N. L. Dukhov VNIIA", Moscow).

Application of the Random Forest statistical method from the machine learning group for predicting the job timing data (queuing time and runtime) was studied. All the experiments were done with a large body of data logged by the Slurm workload manager and job scheduler during different calendar periods. The data processing programs were implemented as scripts within the R statistical system. The key idea of the work was to incorporate new unique job metadata, which have never been employed before, into the structure of the predictive models. The results of the studies demonstrated that the proposed predictive models were twice as efficient as the estimates of users and the job scheduler. This work is the first step in the implementation of automatic job management services at the level of the metadata-based job scheduler to provide automatic processing of resource requests and more efficient notification of users.

Keywords: prediction, job metadata, runtime, latency, Random Forest method.

УДК 519.25

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ОЦЕНКА ОПАСНОСТИ ЦУНАМИ НА ПОБЕРЕЖЬЕ ЕГИПТА В РАЙОНЕ ВОЗВОДИМОЙ АЭС "ЭЛЬ-ДАБАА"

А. И. Зайцев, С. М. Дмитриев, А. А. Куркин, Е. Н. Пелиновский
(НГТУ им. Р. Е. Алексеева, Институт прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород;
Специальное конструкторское бюро автоматизации морских исследований,
Дальневосточное отделение РАН, г. Южно-Сахалинск)

Необходимость оценки опасности цунами на побережье Египта возникла в связи со строительством атомной станции "Эль-Дабаа" (координаты $28,5270^\circ$ в.д., $31,1032^\circ$ с.ш.), тендер на который выиграла российская корпорация "Росатом". Для анализа долговременной опасности цунами использован популярный в настоящее время метод РТНА, основанный на статистическом анализе большого числа реальных и прогностических землетрясений с последующим расчетом волн цунами от возможных землетрясений. Показано, что предсказываемый уровень подъема воды в районе АЭС составляет 6 ± 2 м на период 10 тыс. лет.

Ключевые слова: цунами, долговременный прогноз, АЭС, Египет.

Введение

Исторические данные о проявлении цунами в Египте собраны в каталоге [1] за период 4 тыс. лет (2000 г. до н. э. — 2000 г. н. э.). Кратко перечислим эти события, ссылаясь также на другие источники:

1380 г. до н. э. Извержение вулкана Санторин. Разрушительное цунами достигло Египта: "Вода пришла с севера, поднялся огромный поток и затопил всю страну".

365 г. н. э. Землетрясение на Крите. Вызвало цунами в Ливии, Александрии и Малой Азии. В Александрии "вода отступила на большое расстояние, унеся корабли. А затем она перелилась через дамбу". Около 700 человек утонуло (по другим данным 5 тыс.). Подробные сведения об этом землетрясении и цунами приведены в статье [2].

746 г. н. э. Разрушительное землетрясение в Сирии. Волны наблюдались в Ливане и Египте.

881 г. н. э. Цунами в Палестине и Египте. В Александрии поднялась вода и унесла корабли. Вода поднялась в реке Нил и залила берега.

1034 г. Сильное землетрясение на территории от Сирии до Египта. О волнах цунами сообщается в Израиле; скорее всего, они были и в Египте.

1068 г. Событие, аналогичное произошедшему в 1034 г.

1202 г. Сильное землетрясение в Палестине. В Египте ощущалось на большой площади. О цунами сообщается в Сирии, но предполагается, что оно проявилось в Египте.

1303 г. Катастрофическое землетрясение в восточной части Средиземного моря. Его магнитуда оценивается примерно в $M = 8$. Много разрушений в Каире. В Александрии поднявшаяся вода унесла французский корабль вглубь суши. На реке Нил вода затопила берега на 15 м. Много людей погибло.

1863 г. Разрушительное землетрясение на острове Родос в Эгейском море. Оно ощущалось в Александрии и Суэце. Сведения о цунами вблизи Египта неопределенные.

1870 г. Сильное землетрясение в восточной части Средиземного моря. Ощущалось в Александрии и Каире. В новом порту Александрии наблюдался всплеск воды.

1886 г. Очень сильное землетрясение в Ионическом море. Ощущалось в Египте и Сирии.

Волны цунами наблюдались вплоть до Измир (Турция).

1908 г. Землетрясение и цунами в Мессине (Италия). Существуют свидетельства, что заметные волны цунами достигли побережья Ливии и западного берега Египта, вплоть до Александрии.

Источники наиболее значительных событий представлены на карте (рис. 1), взятой из статьи [3]. Три цунами обусловлены землетрясениями в Греции, и одно пришло из Италии.

Инструментальные данные регистрации цунами в Египте отсутствуют, хотя в работе [4] упоминается существование мареограммы цунами в Александрии после разрушительного землетрясения 1956 г. в Эгейском море (магнитуда 7,5). Однако, существует мареограмма этого же цунами в Яффе (Израиль) с максимальной высотой 28 см; она опубликована в статье [5]. Судя по оценкам спектров мареограмм, сделанных в [4], высота волны в Александрии была меньше, так что это цунами можно отнести к незначительным.

Анализ имеющихся данных

Итак, всего существует 13 событий за 4 тыс. лет, что позволяет указать верхний предел периода повторяемости волн цунами в 300 лет. Вид-

но, однако, что имеющаяся база данных очень неполна, и, скорее всего, в ней много пропусков. Тем не менее ряд событий (1380 г. до н. э., 365, 881, 1303 гг. н. э.) свидетельствует о больших цунами в этом районе. По оценкам из этого каталога, интенсивность цунами сейсмических событий (365, 881 и 1303 гг.) $I \geq 3$, что в соответствии с формулой Соловьёва [6, 7]

$$I = \frac{1}{2} + \log_2 H$$

дает высоту цунами $H \geq 6$ м. Даже если считать, что таких событий было всего три за 2 тыс. лет, то получается, что примерно раз в 600–700 лет может быть разрушительное цунами высотой более 6 м. Если говорить об очень катастрофических землетрясениях и цунами в 365 и 1303 гг., то их повторяемость получается равной одному разу в тысячу лет. Очевидно, что опасностью цунами в таких условиях нельзя пренебрегать.

Имеется также большое количество работ по цунами в Средиземном море, где изучаются конкретные события и обсуждаются цунамигенные зоны, связанные с сейсмической, оползневой и вулканической активностью. Во многих из них Египет упоминается вскользь, и нужную информацию не всегда легко добыть. Особо отметим обзорную статью [8], в которой обсуждаются все

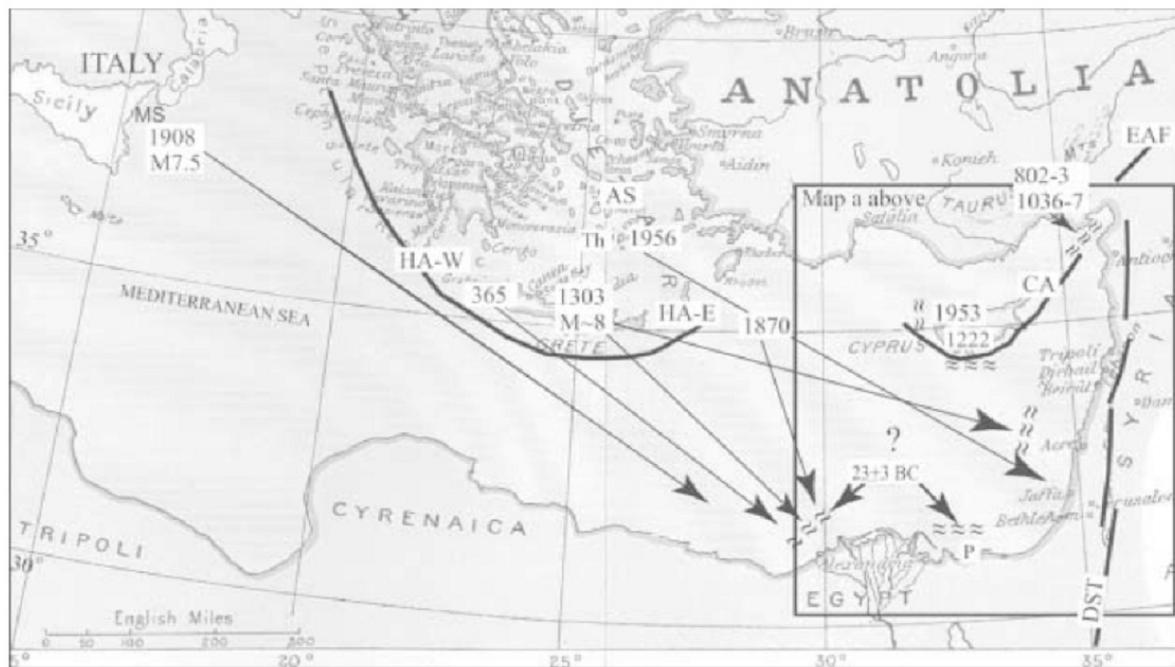


Рис. 1. Источники наиболее сильных исторических цунами в Египте [3]

вопросы, связанные с геофизикой волн цунами в Средиземном море. Приведем здесь карту цунамигенных зон в Средиземном море, которая важна для понимания опасности цунами в Египте (рис. 2, см. также цветную вкладку). Как видно, наиболее цунамигенная зона находится в Греции, она достаточно далека от Египта и экранируется островом Крит. Поэтому волны цунами, приходящие из этой зоны, будут по высоте сравнимы с волнами, приходящими из менее интенсивных зон. Наиболее опасные для Египта очаги цунами находятся около Крита (с его двух сторон); эти зоны достаточно интенсивны и близки по расстоянию к Египту. Именно там находились очаги цунами 365 и 1303 гг., о которых уже упоминалось. Отметим, что положение цунамигенных зон очень хорошо коррелирует с данными наблюдений для побережья Египта, представленными на рис. 1.

Из числа работ по моделированию конкретных событий, имеющих определенное отношение к Египту, упомянем наиболее позднюю работу [9]. В ней содержатся расчеты исторического цунами 365 г., которое было очень катастрофическим (см. сводку цунами во Введении). Его магнитуда оценивается в $M = 8,2$, а его эпицентр на рис. 2 (см. также цветную вкладку) находится в левой зоне относительно острова Крит (см. также рис. 1). Параметры очага неизвестны, поэтому в работе [9] выбрано несколько различных сценариев развития сейсмического процесса и результаты расчетов суммированы (разными цветами) на рис. 3 (см. также цветную вкладку) для побережья Египта. Как видим, высота цунами может достигать 7 м в близкой окрестности к месту строительства АЭС, хотя в районе станции рассчитанная высота волн $H \approx 3$ м. Здесь приводятся данные о высоте волн, а не об ам-

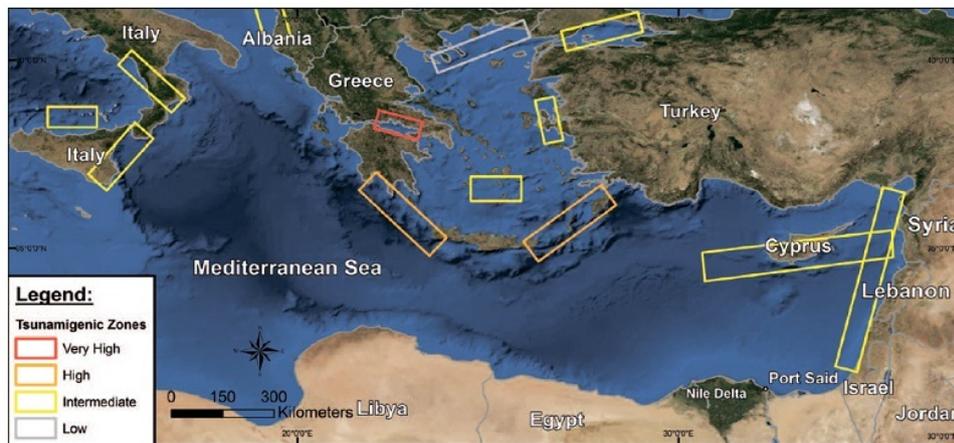


Рис. 2. Цунамигенные зоны в Средиземном море, опасные для Египта [8]

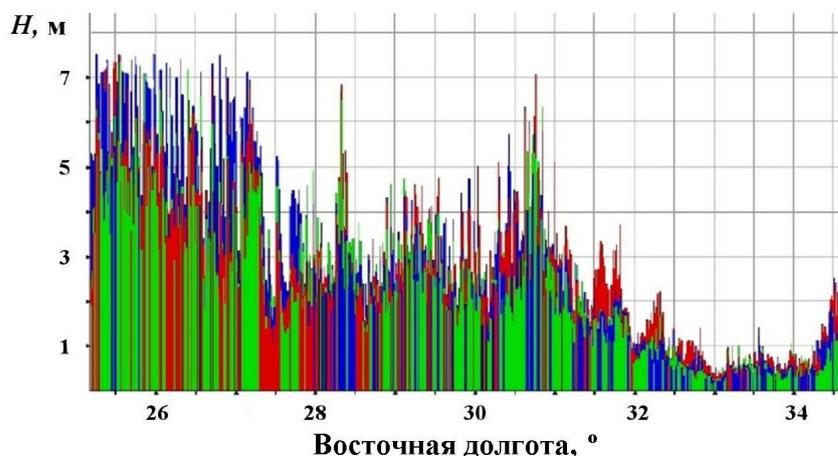


Рис. 3. Распределение рассчитанных высот волн цунами 365 г. вдоль Египта [9]

плитудах. В [9] указано, что в Александрии положительная амплитуда волны (на глубине около 5 м) достигает почти 2,5 м, а отрицательная — почти 3 м. Большие значения рассчитанных высот волн коррелируют с описанием катастрофических последствий этого цунами в Египте.

Вероятностный анализ возможных высот волн

Самый простой вариант получения вероятностных оценок высот цунами — это статистический анализ уже прошедших событий, по аналогии с анализом ветровых волн. Для цунами, однако, ряд наблюдений в фиксированном береговом пункте всегда мал, и это хорошо видно из приведенной во Введении сводки. В некоторых случаях удается объединить наблюдения в нескольких близких пунктах по определенной технологии, названной двухпараметрической схемой цунамирайонирования. Она использовалась для предварительной оценки высот цунами на Тихоокеанском побережье России на период до 100 лет [10]. Для этого необходимо большое число измеренных высот в целом для большого участка побережья, хотя в каждом конкретном пункте число измерений может быть малым. Как видно из приведенных выше данных, для всего побережья Египта число исторических цунами очень мало и недостаточно для количественного анализа, так что этой технологией воспользоваться нельзя. В таких случаях часто используют сценарный подход, рассматривая максимально возможные землетрясения и рассчитывая высоты волн цунами. Такой подход реализован для оценки высот цунами на Дальнем Востоке России [11, 12]. При этом не всегда ясна вероятность появления такого экстремального события.

В настоящее время широкое распространение получил метод РТНА (Probabilistic Tsunami Hazard Assessment — вероятностная оценка опасности цунами). В его основе лежит статистический анализ возможных землетрясений, число которых достаточно велико, с последующим расчетом волн цунами от них [13, 14]. Такой анализ был выполнен для американского штата Орегон [15] и, позднее, Средиземного моря [16]. В настоящее время он применяется в Институте вычислительных технологий СО РАН для оценок долговременной опасности цунами на Дальнем Востоке России. Именно этот подход использован в описываемых исследованиях.

Для вероятностных оценок выбраны только цунами сейсмического происхождения. Несейсмические источники должны быть рассмотрены отдельно. На первом этапе необходим каталог землетрясений, составленный по единому стандарту. Такой каталог за последнюю тысячу лет для Средиземного моря приведен в [17]. Он использован в [16] для создания синтетического каталога потенциальных цунамигенных землетрясений на следующие 100 тыс. лет. В нем сохраняются те же распределения магнитуд и механизмов очага, что и в каталогах реальных событий. Землетрясения рассматривались как случайный пуассоновский процесс с периодичностью, определяемой из формулы Гутенберга—Рихтера. С помощью того же закона определялась магнитуда каждого события. Синтетический каталог содержит 84 920 землетрясений с магнитудой $M > 6,5$ на период 100 тыс. лет. Пространственное распределение землетрясений за период в 10 тыс. лет показано на рис. 4 (см. также цветную вкладку). Цвет характеризует различные механизмы в очаге, на чем останавливаться не будем [16]. Как видно, очаги цунами полностью покрывают Эгейское море и расположены относительно близко от Египта.

Моделирование цунами для каждого случая выполнено [16] в рамках теории мелкой воды с использованием батиметрии GEBCO_08, преформатированной к разрешению в 2^7 (около 3,6 км). Расчеты ведутся до изобаты в 50–100 м (это примерно 75 м в окрестности АЭС). Последние морские точки маркируются, начиная с г. Бензани в Ливии, — всего 32 точки вдоль Египетского побережья. Координаты этих точек заданы в базе данных. Точка 17 наиболее близка к месту возведения АЭС "Эль-Дабаа", ее координаты $28,5270^\circ$ в.д., $31,1032^\circ$ с.ш. Для сопоставления выбраны и соседние точки 16 ($27,9932^\circ$ в.д., $31,1366^\circ$ с.ш.) и 18 ($29,0608^\circ$ в.д., $31,0030^\circ$ с.ш.). Эти точки представлены на карте (рис. 5). Часть расчетов была повторена авторами данной статьи.

Затем высоты волн пересчитываются на берег с помощью известного закона Грина [6]

$$H_R = H_0 \left[\frac{h_0}{h_R} \right]^{1/4},$$

где H_0 — положительная амплитуда волны на глубине h_0 , получаемая из численных расчетов по уравнениям мелкой воды; H_R отождествляется с высотой наката волны на берег; значение

h_R берется равным 1 м. Коэффициент усиления волны в береговой зоне при перепаде глубин от 75 до 1 м составляет $\sim 2,9$.

Ниже будем использовать уже рассчитанный в [16] банк высот наката цунами вдоль побережья Египта. Число рассчитанных высот волн, превышающих 1 мм, в точке 17 составляет

58 294. Это достаточный объем данных для получения статистически значимых результатов.

Частота повторяемости цунами f определяется как число событий с высотой волн, превышающей заданное значение, деленное на временной интервал (в данном случае 100 тыс. лет). Рассчитанная частота повторяемости цунами для береговой точки 17 показана на рис. 6.

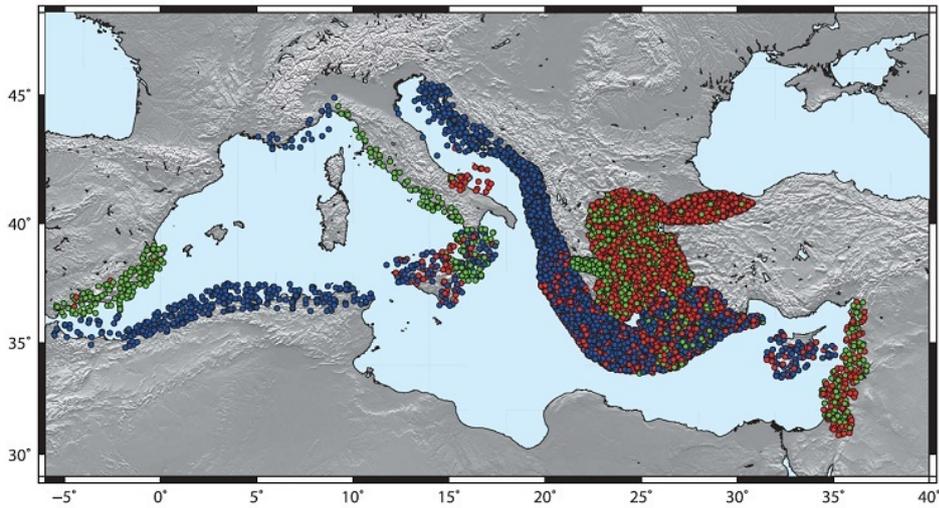


Рис. 4. Пространственное распределение эпицентров потенциальных цунамигенных землетрясений за 10 тыс. лет



Рис. 5. Положение последних морских точек, в которых рассчитаны высоты волн цунами

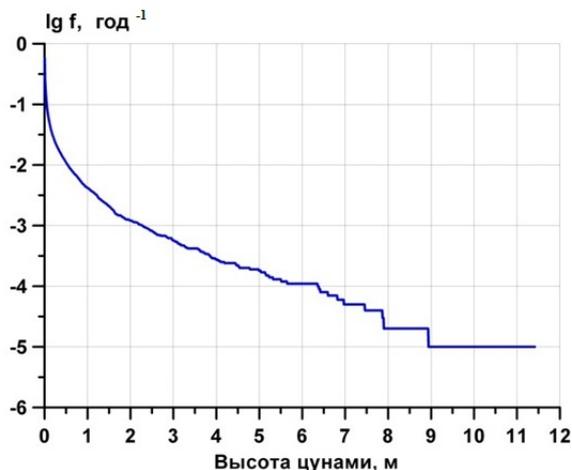


Рис. 6. Частота повторяемости цунами (в логарифмическом масштабе) как функция высоты в точке 17

Максимально рассчитанная высота цунами в точке 17 составляет 11,46 м, следующая по высоте волна — меньше 9 м, последующие — меньше 8 м. Основной же массив данных составляют малые высоты волн цунами от удаленных землетрясений, не представляющие опасности. Поэтому были выделены цунами с высотами более 1 м, которые могут представлять опасность для АЭС и прилегающей территории. Для таких событий уже применимы методы экстремальной статистики, в частности, подходящей аппроксимацией частоты повторяемости, показанной на рис. 7, является экспоненциальная кривая (распределение Гумбеля первого типа)

$$\lg f = -0,2755H - 2,359, \quad (1)$$

где единица измерения частоты повторяемости — год⁻¹, а высоты — м. Для построения регрессии использованы интервал 1–9 м и коэффициент корреляции $R^2 = 0,985$. Отсюда уже можно оценить средний период повторяемости цунами различной высоты. В частности, волна с высотой 2,3 м встречается раз в тысячу лет, а с высотой 6 м — раз в 10 тыс. лет.

Предполагая пуассоновский характер распределения цунами большой амплитуды, можно оценить вероятность превышения заданной высоты в заданный промежуток времени (обесценность):

$$P(H, t) = 1 - \exp(-f(H)t),$$

где $f(H)$ определена формулой (1) (останавливаться на этом не будем).

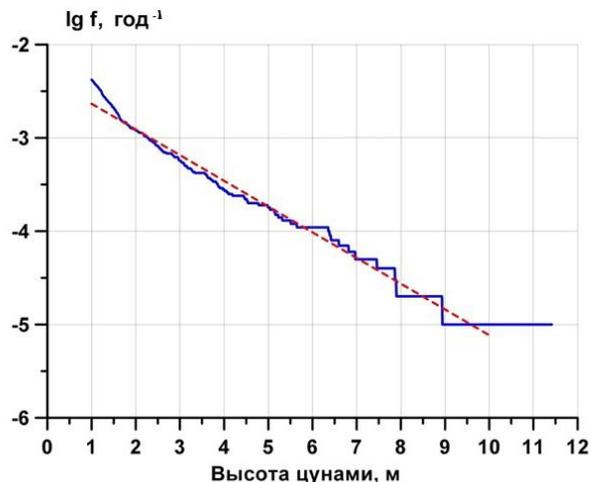


Рис. 7. Частота повторяемости цунами с высотой более 1 м в точке 17: — расчеты; - - - значение по формуле (1)

Сопоставим расчетные значения частот повторяемости цунами в точках, соседних с местом строительства АЭС. На рис. 8 представлены рассчитанные значения частот повторяемости для трех точек: 16, 17 и 18, показанных на карте (см. рис. 5). Как видно, частоты повторяемости различаются между собой. Это сразу видно по наибольшим событиям. Так, если в точке 17 максимальная высота волны составляет 11,4 м, то слева от нее на расстоянии около 3,6 км максимальная высота равна 17 м, а справа на таком же расстоянии — 6,5 м. Различия в частотах повторяемости становятся заметными уже при высотах 1 м и более, что лучше видно на рис. 9. Раз-

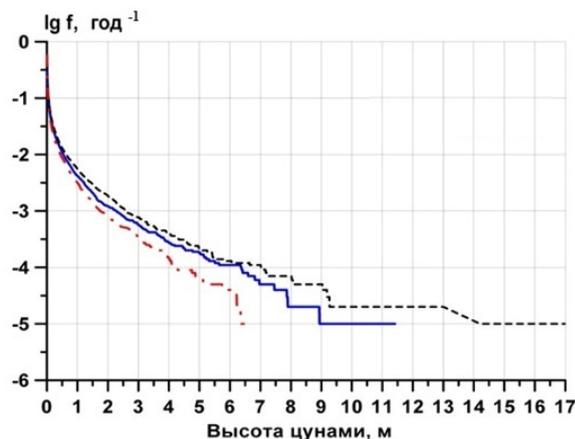


Рис. 8. Рассчитанные частоты повторяемости цунами вблизи места строительства АЭС: - - - точка 16; — точка 17; - · - · точка 18

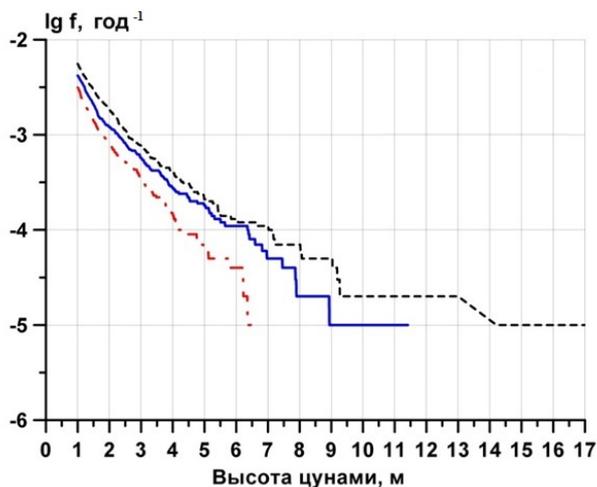


Рис. 9. Рассчитанные частоты повторяемости цунами вблизи места строительства АЭС (удалены точки с высотами меньше 1 м): - - - — точка 16; — — — — точка 17; - · - · — точка 18

брос в предсказываемых высотах волн на период в тысячу лет составляет 1,8–2,5 м, а на период в 10 тыс. лет — от 4,5 до 6,5 м. Вообще говоря, сильная изменчивость высот волн вдоль побережья в других регионах хорошо известна как по историческим данным, так и по данным расчетов и объясняется влиянием топографии прибрежной зоны и направленностью излучения цунами.

Интересно сопоставить рассчитанные высоты волн с имеющимися в литературе для других пунктов Египта. Так, в статье [18] предсказываемые высоты волн в Александрии составляют 1,5 м на тысячу лет и 2,6 м на 10 тыс. лет. В Порт-Саиде предсказываемые высоты волн значительно больше: 3 м на тысячу лет и около 5 м на 10 тыс. лет. Эти результаты основаны на меньшем количестве расчетов и, скорее всего, занижены, если судить по данным наблюдений в Александрии.

Заключение

Простой анализ наблюдений цунами в Египте за последние 2 тыс. лет свидетельствует, как минимум, о двух случаях (365 и 1303 гг.) с высотами волн, превышающими 6 м. Повторяемость таких цунами грубо оценивается в тысячу лет. Эти данные наблюдений относятся к Александрии, измеренные высоты волн в районе Эль-Дабба отсутствуют. Если использовать данные

уже имеющихся численных расчетов этих катастрофических событий и им верить, то в 365 и 1303 гг. высота волн в районе Эль-Дабба была около 4 м [9, 19]. Проведенный авторами вероятностный анализ приводит к высоте волн 6 м на период в 10 тыс. лет. При суммировании исторических данных и результатов расчетов в районе АЭС кажутся вполне реальными высоты волн цунами в интервале 4–8 м на период около 10 тыс. лет. Разумеется, эта оценка носит предварительный характер, поскольку основана на расчетах волн цунами на достаточно грубой сетке.

Данное исследование поддержано грантом Российского фонда фундаментальных исследований 18-05-80018 (программа "Опасные явления").

Список литературы

1. Соловьёв С. Л., Го Ч. Н., Ким Х. С., Соловьёва О. Н., Щетников Н. А. Цунами в Средиземном море: 2000 до нашей эры – 1991. М.: Межведомственный геофизический комитет, 1997.
Soloviev S. L., Solovieva O. N., Go Ch. N., Kim Kh. S., Shchetnikov N. A. Tsunamis in the Mediterranean Sea 2000 B. C. - 2000 A. D. Hagerstown: Kluwer, 2000.
2. Pararas-Carayannis G. The earthquake and tsunami of July 21, 365 AD in the Eastern Mediterranean Sea — Review of impact on the Ancient World — Assessment of recurrence and future impact // *Science of Tsunami Hazards*. 2011. Vol. 30, No 4. P. 253–292.
3. Salamon A., Rockwell T., Ward S. N., Guidoboni E., Comastri A. Tsunami hazard evaluation of the Eastern Mediterranean: Historical analysis and selected modeling // *Bulletin of the Seismological Society of America*. 2007. Vol. 97, No 3. P. 705–724.
4. Van Dorn W. G. Tide gage response to tsunamis. Pt II: other oceans and smaller seas // *J. Physical Oceanography*. 1987. Vol. 17. P. 1507–1516.
5. Beisel S., Chubarov L., Didenkulova I., Kit E., Levin A., Pelinovsky E., Shokin Y., Sladkevich M. The 1956 Greek tsunami recorded at Yafo, Israel, and its numerical modeling // *J. Geophysical Research*. 2009. Vol. 114. P. C09002.

6. Пелиновский Е. Н. Гидродинамика волн цунами. Нижний Новгород: ИПФ РАН, 1996. *Pelinovskiy E. N. Hidrodinamika voln tsunami. Nizhniy Novgorod: IPF RAN, 1996.*
7. Левин В. В., Носов М. А. Физика цунами. М.: Янус-К, 2005. *Levin V., Nosov M. Physics of Tsunamis. Doetinchem: Springer, 2009.*
8. Papadopoulos G. A., Gracia E., Urgeles R., Sallares V., De Martini P. M., Pantosti D., Gonzalez M., Yalciner A. C., Mascle J., Sakellariou D., Salamon A., Tinti S., Karastathis V., Fokaefs A., Camerlenghi A., Novikova T., Papageorgiou A. Historical and pre-historical tsunamis in the Mediterranean and its connected seas: Geological signatures, generation mechanisms and coastal impacts // *Marine Geology*. 2014. Vol. 354. P. 81—109.
9. Lobkovsky L., Mazova R., Tyuntyaev S., Remizov I. Features and problems with historical great earthquakes and tsunamis in the Mediterranean Sea // *Science of Tsunami Hazards*. 2016. Vol. 35, No 3. P. 167—188.
10. Го Ч. Н., Кайстренко В. М., Пелиновский Е. Н., Симонов К. В. Количественная оценка цунамиопасности тихоокеанского побережья СССР // *Тихоокеанский ежегодник*. Владивосток, 1988. С. 9—17. *Go Ch. N., Kaistrenko V. M., Pelinovsky E. N., Simonov K. V. A quantitative estimation of tsunami hazard and the tsunami zoning Scheme of the Pacific Coast of the USSR // Pacific Annual. Vladivostok, 1988. P. 7—15.*
11. Куркин А. А., Пелиновский Е. Н., Чой Б., Ли Дж. С. Сравнительная оценка цунамиопасности япономорского побережья России на основе численного моделирования // *Океанология*. 2004. Т. 44, № 2. С. 179—188. *Kurkin A., Pelinovskii E., Choi B. H., Lee J. S. A Comparative estimation of the tsunami hazard for the Russian Coast of the Sea of Japan based on numerical simulation // Oceanology. 2004. Vol. 44, No 2. P. 163—172.*
12. Бейзел С. А., Гусяков В. К., Чубаров Л. Б., Шожин Ю. И. Численное моделирование воздействия удаленных цунами на дальневосточное побережье России // *Известия РАН. Физика атмосферы и океана*. 2014. Т. 50, № 5. С. 578—590. *Beisel S. A., Gusiakov V. K., Chubarov L. B., Shokin Yu. I. Numerical simulation of the action of distant tsunamis on the Russian Far East coast // Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics. 2014. Vol. 50, No 5. P. 508—519.*
13. Geist E. L., Parsons T. Probabilistic analysis of tsunami hazards // *Natural Hazards*. 2006. Vol. 37. P. 277—314.
14. Grezio A., Babeyko A., Baptista M. A., Behrens J., Costa A., Davies G., Geist E. L., Glimsdal S., Gonzalez F. I., Griffin J., Harbitz C. B., LeVeque R. J., Lorito S., Lovholt F., Omira R., Mueller C., Paris R., Parsons T., Polet J., Power W., Selva J., Sorensen M. B., Thio H. K. Probabilistic Tsunami Hazard Analysis (PTHA): Multiple sources and global applications // *Reviews Geophysics*. 2017. Vol. 55. P. 1158—1198.
15. Gonzalez F. I., Geist E. L., Jaffe B., Kanoglu U., Mofjeld H., Synolakis C. E., Titov V. V., Arcas D., Bellomo D., Carlton D., Horning T., Johnson J., Newman J., Parsons T., Peters R., Peterson C., Priest G., Venturato A., Weber J., Wong F., Yalciner A. Probabilistic tsunami hazard assessment at Seaside, Oregon, for near- and far-field seismic sources // *J. Geophysical Research*. 2009. Vol. 114. P. C11023.
16. Sorensen M. B., Spada M., Babeyko A., Wiemer S., Grunthal G. Probabilistic tsunami hazard in the Mediterranean Sea // *Ibid.* 2012. Vol. 117. P. B01305.
17. Grunthal G., Wahlstrom R. The European-Mediterranean Earthquake Catalogue (EMEC) for the last millennium // *J. Seismology*. 2012. Vol. 16, No 3. P. 535—570.
18. Tobias J., Stiassnie M. Synthetic tsunamis along the Israeli coast // *Phil. Trans. R. Soc. A*. 2012. Vol. 370. P. 1677—1686.
19. Hamouda A. Z. Numerical computations of 1303 tsunamigenic propagation towards Alexandria, Egyptian Coast // *J. African Earth Sciences*. 2006. Vol. 44. P. 37—44.

Статья поступила в редакцию 24.01.19.

PROBABILISTIC ASSESSMENT OF THE DANGER OF A TSUNAMI ON THE COAST OF EGYPT IN THE AREA NEAR "EL DABAA" NPP UNDER CONSTRUCTION / A. I. Zaytsev, S. M. Dmitriev, A. A. Kurkin, E. N. Pelinovsky (NSTU n. a. R. E. Alekseev, Institute of Applied Physics of Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod; Special Research Bureau for Automation of Marine Researches, Far East Branch of Russian Academy of Sciences, Yuzhno-Sakhalinsk).

The need to assess the danger of tsunami at Egyptian shore was brought with the construction of "El Dabaa" NPP (coordinates 28.5270 ° E, 31.1032 ° N); Russian corporation Rosatom won the tender for its construction. To do a long-term tsunami threat analysis, we used a currently widely used PTHA method based on statistical analysis of a great number of real and forecasted earthquakes followed up with computations on tsunami waves resulted from the earthquakes. It is shown that the predicted level of the water rise in the region of the NPP makes 6 ± 2 m for the period of 10 thousand years.

Keywords: tsunami, long-term forecast, NPP, Egypt.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Володина Наталия Александровна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: NAVolodina@vniief.ru

Дмитриев Сергей Михайлович — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, заведующий кафедрой, *e-mail*: dmitriev@nntu.ru

Жучков Роман Николаевич — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: RNZhuchkov@vniief.ru

Зайцев Андрей Иванович — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, старший научный сотрудник, *e-mail*: aizaytsev@mail.ru

Иванов Николай Владимирович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, ведущий научный сотрудник

Козелков Андрей Сергеевич — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательского отдела, *e-mail*: ASKozelkov@vniief.ru

Куркин Андрей Александрович — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, главный научный сотрудник, *e-mail*: aakurkin@gmail.com

Пелиновский Ефим Наумович — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, главный научный сотрудник, *e-mail*: pelinovsky@gmail.com

Петунин Сергей Александрович — ВНИИА им. Н. Л. Духова, г. Москва, главный специалист, *e-mail*: s.a.petunin@gmail.com

Саразов Алексей Владимирович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: A.V.Sarazov@itmf.vniief.ru

Стенин Александр Михайлович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник

Стручков Андрей Викторович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник

Титова Виктория Борисовна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: VBTitova@vniief.ru

Уткина Анна Александровна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: AAUtkina@vniief.ru

Шестаков Александр Александрович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забахина", г. Снежинск Челябинской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: A.A.Shestakov2012@yandex.ru

Ширшова Мария Олеговна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: shirsh@vniief.ru

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Volodina Nataliya Aleksandrovna — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, *e-mail*: NAVolodina@vniief.ru

Dmitriev Sergey Mikhaylovich — R. E. Alekseev NSTU, N. Novgorod, head of department, *e-mail*: dmitriev@nntu.ru

Zhuchkov Roman Nikolaevich — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, leading scientist, *e-mail*: RNZhuchkov@vniief.ru

Zaytsev Andrey Ivanovich — Alekseev NSTU, N. Novgorod, senior scientist, *e-mail*: aizaytsev@mail.ru

Ivanov Nikolay Vladimirovich — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, leading scientist

Kozelkov Andrey Sergeevich — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research division, *e-mail*: ASKozelkov@vniief.ru

Kurkin Andrey Aleksandrovich — R. E. Alekseev NSTU, N. Novgorod, chief scientist, *e-mail*: aakurkin@gmail.com

Pelinovsky Efim Naumovich — R. E. Alekseev NSTU, N. Novgorod, chief scientist, *e-mail*: pelinovsky@gmail.com

Petunin Sergey Aleksandrovich — N. L. Dukhov VNIIA, Moscow, chief specialist, *e-mail*: s.a.petunin@gmail.com

Sarazov Aleksey Vladimirovich — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, senior scientist, *e-mail*: A.V.Sarazov@itmf.vniief.ru

Stenin Aleksandr Mikhaylovich — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, senior scientist

Struchkov Andrey Viktorovich — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist

Titova Viktoriya Borisovna — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, *e-mail*: VBTitova@vniief.ru

Utkina Anna Aleksandrovna — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, senior scientist, *e-mail*: AAUtkina@vniief.ru

Shestakov Aleksandr Aleksandrovich — FSUE "Academician E.I.Zababakhin RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region, leading scientist, *e-mail*: A.A.Shestakov2012@yandex.ru

Shirshova Mariya Olegovna — FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, senior scientist, *e-mail*: shirsh@vniief.ru

СО Д Е Р Ж А Н И Е

<i>Стенин А. М.</i> Консервативный пересчет величин в разностных схемах газовой динамики на лагранжево-эйлеровой сетке	3
<i>Шестаков А. А.</i> TVDR-схемы для решения системы уравнений переноса теплового излучения	17
<i>Володина Н. А., Титова В. Б., Ширшова М. О.</i> Результаты численного моделирования в методике ЛЭГАК изменения ударно-волновой чувствительности ВВ типа ТАТБ при многократном воздействии ударных волн	37
<i>Иванов Н. В.</i> Условие выбора мажоранты в методе "максимального сечения"	50
<i>Стручков А. В., Козелков А. С., Жучков Р. Н., Уткина А. А., Саразов А. В.</i> Численное моделирование задач аэродинамики со статической адаптацией сетки под особенности решения	55
<i>Петунин С. А.</i> Эффективное прогнозирование временных характеристик вычислительных заданий по расширенным метаданным	68
<i>Зайцев А. И., Дмитриев С. М., Куркин А. А., Пелиновский Е. Н.</i> Вероятностная оценка опасности цунами на побережье Египта в районе возводимой АЭС "Эль-Даббаа"	81
Сведения об авторах	90

C O N T E N T S

<i>Stenin A. M.</i> Conservative remapping in gas-dynamic difference schemes on Lagrangian-Eulerian meshes	3
<i>Shestakov A.A.</i> TVDR-schemes to solve a system of radiative heat transfer equations	17
<i>Volodina N. A., Titova V. B., Shirshova M. O.</i> Results of numerical simulations of variations in the shock sensitivity of TATB-type high explosives in response to multiple shock waves in the LEGAK code	37
<i>Ivanov N. V.</i> Majorant selection condition in the maximum cross-section method	50
<i>Struchkov A. V., Kozelkov A. S., Zhuchkov R. N., Utkina A. A., Sarazov A. V.</i> Numerical simulation of aerodynamic problems with static mesh adaptation for solution features	55
<i>Petunin S. A.</i> Efficient job timing data prediction based on extended metadata	68
<i>Zaitsev A. I., Dmitriev S. M., Kurkin A. A., Pelinovsky E. N.</i> Probabilistic risk assessment of tsunamis on the coast of Egypt near the El Dabaa NPP construction site	81
Information about authors	91

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редактор Е. Н. Старченко

Корректоры Н. Ю. Костюничева
Т. А. Меркушева
Е. А. Окатьева
А. В. Федоренко

Подписано в печать 23.05.2019
Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 12
7 статей

Формат 60×84/8
Уч.-изд. л. ~ 14

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

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

Отпечатано в ИПЦ 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 α ("альфа"), v и ν ("ню"), c и C) желательно 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

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

КОНСЕРВАТИВНЫЙ ПЕРЕСЧЕТ ВЕЛИЧИН В РАЗНОСТНЫХ СХЕМАХ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ НА ЛАГРАНЖЕВО-ЭЙЛЕРОВОЙ СЕТКЕ / А. М. Стенин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 2. С. 3–16.

Представлен консервативный по полной энергии глобальный алгоритм пересчета величин на эйлеровом этапе счета шага по времени в разностных схемах газовой динамики на регулярной четырехугольной лагранжево-эйлеровой пространственной сетке. Значения газодинамических величин на новой сетке вычисляются из условия сохранения соответствующих интегральных величин. Вычисление новых значений удельной внутренней энергии производится на основе сохранения интегральной внутренней энергии с учетом поправок, обеспечивающих сохранение полной энергии. Если на лагранжевом этапе счета шага по времени используется полностью консервативная разностная схема, то консервативный пересчет величин обеспечивает полную консервативность схемы по совокупности обоих этапов, лагранжева и эйлерова. Приводятся результаты тестовых расчетов задачи о сильном точечном взрыве (рис. 4, список лит. — 12 назв.).

Ключевые слова: газовая динамика, лагранжево-эйлеровы сетки, пересчет величин, полностью консервативная схема, седовский взрыв.

УДК 517.958:536.2

TVDR-СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ / А. А. Шестаков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 2. С. 17–36.

Проблеме построения численных методов решения уравнения переноса излучения посвящено огромное число работ. Отдельно среди них выделяются методы решения системы уравнений переноса теплового излучения, которая дополнительно включает в себя уравнение для внутренней энергии среды с учетом обменных процессов взаимодействия излучения с веществом. Из-за существенной нелинейности этих процессов при решении задачи переноса теплового излучения предъявляются высокие требования к качеству выбираемых численных методик.

Во-первых, эти методики должны обладать эффективным методом разрешения нелинейности данной задачи. Во-вторых, из-за семимерного пространства всех переменных аппроксимационная система должна решаться экономичным методом, в котором число арифметических операций пропорционально количеству узлов разностной сетки. В-третьих, разностная дискретизация, кроме естественных условий — аппроксимации, абсолютной устойчивости и сходимости, должна удовлетворять дополнительным требованиям: консервативности, безусловной монотонности и положительности для положительных функций.

В работе проведены исследования новых неявных безусловно монотонных разностных схем повышенного порядка (выше первого) аппроксимации для задач переноса теплового излучения (рис. 2, список лит. — 48 назв.).

Ключевые слова: уравнение переноса излучения, разностные схемы.

УДК 519.6

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В МЕТОДИКЕ "ЛЭГАК" ИЗМЕНЕНИЯ УДАРНО-ВОЛНОВОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ВВ ТИПА ТАТБ ПРИ МНОГОКРАТНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ УДАРНЫХ ВОЛН / Н. А. Володина, В. Б. Титова, М. О. Ширшова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 2. С. 37—49.

Представлены результаты работы по развитию кинетической модели детонации МК в методике ЛЭГАК для универсального учета зависимости ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ от его состояния перед фронтом инициирующей ударной волны. Изменения в модели коснулись формулы, "отвечающей" за плотность рождения горячих очагов разложения ВВ вблизи фронта ударной волны, а также алгоритма выделения фронта ударной волны и анализа состояния вещества перед этим фронтом. Реализованная модификация модели кинетики МК протестирована на экспериментальных данных для ВВ на основе ТАТБ при начальных плотностях $1,3 \text{ г/см}^3 \leq \rho_0 \leq 1,91 \text{ г/см}^3$.

Предложенный алгоритм позволяет автоматически учитывать состояние ВВ перед фронтом ударной волны и единым образом описывать экспериментальные данные как по сенсбилизации, так и по десенсбилизации ВВ при многократных ударно-волновых воздействиях (рис. 11, список лит. — 12 назв.).

Ключевые слова: кинетика детонации, ударно-волновая чувствительность, ТАТБ.

УДК 519.6

УСЛОВИЕ ВЫБОРА МАЖОРАНТЫ В МЕТОДЕ "МАКСИМАЛЬНОГО СЕЧЕНИЯ" / Н. В. Иванов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 2. С. 50—54.

При решении уравнений переноса частиц методом Монте-Карло для упрощения моделирования пробегов частиц широко используется метод *максимального сечения*. На численном примере показано, что этот метод приводит к правильному распределению пробегов частиц только при соблюдении одного условия: соответствующая максимальному сечению плотность распределения пробегов должна быть нормирована (рис. 1, список лит. — 5 назв.).

Ключевые слова: уравнение переноса частиц, метод Монте-Карло, моделирование пробегов частиц, выбор максимального сечения.

УДК 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ АЭРОДИНАМИКИ СО СТАТИЧЕСКОЙ АДАПТАЦИЕЙ СЕТКИ ПОД ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ / А. В. Стручков, А. С. Козелков, Р. Н. Жучков, А. А. Уткина, А. В. Саразов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 2. С. 55—67.

Представлено описание алгоритма численного решения задач аэродинамики, основанного на выделении областей ударных волн и последующем измельчении в них расчетной сетки посредством метода адаптивно-встраиваемых сеток. Применяемый метод основан на дроблении ячеек за счет добавления новых узлов на грани. Выделение области ударных волн для адаптации осуществляется с использованием критерия на основе градиента давления и градиента плотности. Предлагаемый алгоритм реализован на произвольных неструктурированных сетках и ориентирован на конечно-объемную дискретизацию системы уравнений Навье—Стокса. Применение алгоритма демонстрируется на задачах о трансзвуковом обтекании профиля НАСА0012 и сверхзвуковом обтекании клина. Показано, что использование предложенного метода адаптивных сеток существенно улучшает качество численного решения, полученного на грубых сетках (рис. 15, табл. 4, список лит. — 27 назв.).

Ключевые слова: аэродинамика, численное моделирование, адаптивные сетки, трансзвуковое и сверхзвуковое течение, ударные волны.

УДК 519.6

ЭФФЕКТИВНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ВРЕМЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАДАНИЙ ПО РАСШИРЕННЫМ МЕТАДАНЫМ / С. А. Петунин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 2. С. 68–80.

В составе системного программного обеспечения большинства высокопроизводительных вычислительных систем в настоящее время используется менеджер ресурсов и планировщик заданий Slurm. База данных статистики планировщика является основным источником анализа рабочей нагрузки, понимание которой позволяет повышать эффективность использования ресурсов вычислительных систем.

Проведено исследование применения статистического метода Random Forest, относящегося к группе машинного обучения, для прогнозирования временных показателей вычислительного задания: времени ожидания в очереди и времени выполнения. Все эксперименты проведены на журнальных данных большого объема менеджера ресурсов и планировщика заданий Slurm, накопленных в течение различных календарных периодов. Программы обработки данных реализованы в виде скриптов в рамках статистической системы R. Принципиальной идеей работы явилось включение в структуру прогнозных моделей новых уникальных метаданных вычислительных заданий, не используемых ранее. Результаты исследований показали более чем двукратную эффективность предложенных прогнозных моделей по сравнению с оценками пользователей и планировщика. Работа является первым шагом в проекте внедрения автоматических сервисов управления вычислительными заданиями на уровне метапланировщика в целях автоматизации запросов ресурсов, а также для более качественного оповещения пользователей (рис. 11, табл. 5, список лит. — 14 назв.).

Ключевые слова: прогнозирование, метаданные вычислительного задания, время выполнения, время ожидания, метод Random Forest.

УДК 519.25

ВЕРОЯТНОСТНАЯ ОЦЕНКА ОПАСНОСТИ ЦУНАМИ НА ПОБЕРЕЖЬЕ ЕГИПТА В РАЙОНЕ ВОЗВОДИМОЙ АЭС "ЭЛЬ-ДАБАА" / А. И. Зайцев, С. М. Дмитриев, А. А. Куркин, Е. Н. Пелиновский // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 2. С. 81–89.

Необходимость оценки опасности цунами на побережье Египта возникла в связи со строительством атомной станции "Эль-Даббаа" (координаты 28, 5270° в.д., 31, 1032° с.ш.), тендер на который выиграла российская корпорация "Росатом". Для анализа долговременной опасности цунами использован популярный в настоящее время метод РТНА, основанный на статистическом анализе большого числа реальных и прогностических землетрясений с последующим расчетом волн цунами от возможных землетрясений. Показано, что предсказываемый уровень подъема воды в районе АЭС составляет 6 ± 2 м на период 10 тыс. лет (рис. 9, список лит. — 19 назв.).

Ключевые слова: цунами, долговременный прогноз, АЭС, Египет.

CONSERVATIVE REMAPPING IN GAS-DYNAMIC DIFFERENCE SCHEMES ON LAGRANGIAN-EULERIAN MESHES / A. M. Stepin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 2. P. 3–16.

The paper describes a conservative-in-total-energy global remapping algorithm for the Eulerian stage of the time step in gas-dynamic difference schemes on regular tetragonal Lagrangian-Eulerian spatial meshes. The values of the gas-dynamic quantities are remapped with conservation of the respective integral values. The values of specific internal energy are remapped subject to the conservation of the integral internal energy with corrections that provide total energy conservation. If a fully conservative difference scheme is used at the Lagrangian time-step stage, then the conservative remapping renders the whole scheme fully conservative at both Lagrangian and Eulerian stages. The results of benchmark computations of a strong point explosion are presented.

Key words: gas dynamics, Lagrangian-Eulerian meshes, remapping, a fully conservative scheme, the Sedov blast.

TVDR-SCHEMES TO SOLVE A SYSTEM OF RADIATIVE HEAT TRANSFER EQUATIONS / A. A. Shestakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 2. P. 17–36.

A great number of works are devoted to the problem of designing numerical methods to solve the radiative transfer equation. A separate group among them consists of the methods for solving the system of radiative heat transfer equations with an additional equation of internal energy of matter to account for the exchange processes of radiation/matter interaction. Due to the considerable non-linearity of these processes, high requirements are set for the quality of the selected numerical techniques when solving the radiative heat transfer problems.

Firstly, these techniques should incorporate an efficient method to resolve the non-linearity of this problem. Secondly, because of the 7D space of all variables, the approximation system should be solved by a cost-effective method, in which the number of arithmetic operations is proportional to the number of nodes of the difference mesh. Thirdly, along with natural requirements (approximation, absolute stability and convergence), the difference discretization should satisfy additional requirements of conservatism, unconditional monotonicity and positivity for positive functions.

The paper presents the research on new implicit unconditionally monotone difference schemes of a higher order of approximation (higher than the first one) for the problems of radiative heat transfer.

Key words: radiative transfer equation, difference schemes.

RESULTS OF NUMERICAL SIMULATIONS OF VARIATIONS IN THE SHOCK SENSITIVITY OF TATB-TYPE HIGH EXPLOSIVES IN RESPONSE TO MULTIPLE SHOCK WAVES IN THE LEGAK CODE / N. A. Volodina, V. B. Titova, M. O. Shirshova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 2. P. 37–49.

The paper presents the results of modification of the MK detonation kinetics model in the LEGAK code to enable universal accounting for the shock sensitivity of TATB-based HE depending on its state before the front of the initiating shock wave. The changes in the model apply to the formula responsible for the density of hot-spot formation near the shockwave front, and to the algorithm for shock wave front tracking and analysis of the state of matter before the shock-wave front. The realized modification of the MK model was tested using experimental data for TATB-based HE with initial densities of $1,3 \text{ g/cm}^3 \leq \rho_0 \leq 1,91 \text{ g/cm}^3$.

The proposed algorithm enables automatic accounting for the state of HE before the shock front and uniform description of experimental data for both sensitizing and desensitizing of HE in response to multiple shock waves.

Key words: detonation kinetics, shock sensitivity, TATB.

MAJORANT SELECTION CONDITION IN THE MAXIMUM CROSS-SECTION METHOD / N. V. Ivanov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 2. P. 50–54.

The maximum cross-section method is widely used in the Monte Carlo simulations of the particle transport equations to simplify the pathlength modeling procedure. Using a numerical example we show that this method delivers a correct pathlength distribution if only one condition is observed: the pathlength distribution density corresponding to the maximum cross-section should be normalized.

Key words: particle transport equation, Monte Carlo method, pathlength modeling, choice of the maximum cross-section.

NUMERICAL SIMULATION OF AERODYNAMIC PROBLEMS WITH STATIC MESH ADAPTATION FOR SOLUTION FEATURES / A. V. Struchkov, A. S. Kozelkov, R. N. Zhuchkov, A. A. Utkina, A. V. Sarazov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 2. P. 55–67.

The algorithm for numerical solution of aerodynamic problems based on the identification of shock-wave regions and subsequent adaptive mesh refinement in such regions is described. The method is based on the cell partitioning by adding new nodes to cell faces. The shock-wave regions, where the mesh will be refined, are identified using a pressure and density gradient criterion. The proposed algorithm is implemented on arbitrary unstructured meshes and designed for the finite-volume discretization of the system of Navier-Stokes equations. Application of the algorithm is demonstrated on the problems of transonic airflow of the NACA0012 airfoil and supersonic airflow of a wedge. The proposed adaptive mesh refinement method is shown to improve considerably the quality of the numerical solution produced on coarse meshes.

Key words: aerodynamics, numerical simulation, adaptive mesh, transonic and supersonic flow, shock waves.

EFFICIENT JOB TIMING DATA PREDICTION BASED ON EXTENDED METADATA / S. A. Petunin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 2. P. 68–80.

Most of today's high-performance computing systems use the Slurm workload manager and job scheduler in their system software. The scheduler's statistics database is the main source of workload analysis, and its understanding makes it possible to improve the efficiency of workload management in computing systems.

Application of the Random Forest statistical method from the machine learning group for predicting the job timing data (queuing time and runtime) was studied. All the experiments were done with a large body of data logged by Slurm during different calendar periods. The data processing programs were implemented as scripts within the R statistical system. The key idea of the work was to incorporate new unique job metadata, which have never been employed before, into the structure of the predictive models. The results of the studies demonstrated that the proposed predictive models were twice as efficient as the estimates of users and the job scheduler. This work is the first step in the implementation of automatic job management services at the level of the metadata-based job scheduler to provide automatic processing of resource requests and more efficient notification of users.

Key words: prediction, job metadata, runtime, latency, Random Forest method.

PROBABILISTIC RISK ASSESSMENT OF TSUNAMI ON THE COAST OF EGYPT NEAR THE EL DABAA NPP CONSTRUCTION SITE / A. I. Zaytsev, S. M. Dmitriev, A. A. Kurkin, E. N. Pelinovsky // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 2. P. 81–89.

The need to assess the risk of tsunami on the Egyptian coast is associated with the El Dabaa NPP construction project (coordinates 28,5270° E, 31,1032° N), the tender for which has been won by the Russian corporation Rosatom. To carry out the long-term tsunami risk analysis, we used the popular PTHA method based on the statistical analysis of a great number of real and predicted earthquakes and subsequent simulations of tsunami waves triggered by hypothesized earthquakes. It is shown that the predicted water rise level in the region of the NPP makes 6 ± 2 m for the period of 10 thousand years.

Key words: tsunami, long-term prediction, NPP, Egypt.