

выпуск з

# Математическое моделирование физических процессов

СЕРИЯ

Вопросы Атомной Науки и Техники

Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ

ISSN 2414-0171

#### 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/

> > (с) ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2019

# ФГУП "РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР — ВНИИЭФ"

# ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

# СЕРИЯ

# Математическое моделирование физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 3

Издается с 1978 г.

## Саров — 2019

## СОДЕРЖАНИЕ

Янилкин Ю. В. Численное исследование взаимовлияния зоны турбулентного перемешива- ния и локальных возмущений границы раздела в задаче гравитационного турбулентного
перемешивания
Чубарешко И. С., Шестаков А. А. Разностная схема УРАЛ для решения гиперболической системы <i>P</i> <sub>1</sub> -уравнений
Володина Н. А., Краюхин С. А. Алгоритм итерационной коррекции времен детонации за счет учета направления движения детонационной волны в методике ЛЭГАК
Алексеев А. В., Бнятов А. В., Крутько Н. А., Раткевич С. С. Комплекс программ GROUND2 обработки оцененных ядерных данных и расчета систем групповых констант
Соколов С. С., Новиков И. Г., Воропинов А. А., Половникова Т. Н. Методы балансировки вычислительной нагрузки в методике ТИМ
Бахаев А. Н., Машенькин П. А., Сидоров М. Л. Модели насыщенно-ненасыщенной и напорно- безнапорной фильтрации в комплексе программ НИМФА
Соловьёв В. П., Анисин А. В., Анисина И. М., Надёжин С. С., Железнов М. М., Певз- нер В. О., Третьяков И. В. Модель деформируемости грунтового основания железнодорож- ного пути при пропуске длинносоставных поездов
Памяти Виталия Ефимовича Трощиева
Сведения об авторах

# CONTENTS

Yanilkin Yu. V. Numerical study of the interrelation of turbulent mixing area and local disturbances of interface in the gravitational turbulent mixing problem
Chubareshko I. S., Shestakov A. A. Difference scheme URAL for solving a hyperbolic system of $P_1$ -equations
Volodina N. A., Krayukhin S. A. An algorithm of iteratively correcting detonation times by means of accounting the moving detonation wave direction in LEGAK code
Alekseev A. V., Bnyatov A. V., Krutko N. A., Ratkevich S. S. The GROUND2 software system for evaluated nuclear data processing and group constant systems calculation
Sokolov S. S., Novikov I. G., Voropinov A. A., Polovnikova T. N. Computational load balancing in TIM code
Bakhaev A. N., Mashenkin P. A., Sidorov M. L. Models of saturated-unsaturated and confined- unconfined flows in NIMFA software
Soloviev V. P., Anisin A. V., Anisina I. M., Nadezhin S. S., Zheleznov M. M., Pevzner V. O., Tretyakov I. V. A model of the railway ground bed deformation by passing long trains
In memory of Vitaliy Efimovich Troshchiev
Information about authors

Ответственный за выпуск Е.В. Соколовская						
Редактор	Е. Н. Старченко	ł	Корректоры	Н. Ю. Костюничева		
				Т. А. Меркушева		
				Е. А. Окатьева		
				А. В. Федоренко		
Подписано в печать 25.07.2019 Формат 60×84/8						
Усл. печ. л. ~ 12 Учизд. л. ~ 14						
Тира	ж 1000 экз.	Зак. тип. 130	09-2019	7 статей		
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 Нижегоролской обл. ул. Силкина 23						
ouries, i. capob innaciopodekon oosi, ysi. Chsikuna, 25						

УДК 519.6

### ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОВЛИЯНИЯ ЗОНЫ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ И ЛОКАЛЬНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА В ЗАДАЧЕ ГРАВИТАЦИОННОГО ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

#### Ю. В. Янилкин

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

Работа посвящена численному моделированию развития отдельного локального возмущения в зоне турбулентного перемешивания, возникающей вследствие неустойчивости Рэлея—Тейлора при постоянном ускорении контактной границы между двумя разноплотными газами. С помощью прямого трехмерного численного моделирования по методике ЭГАК (без моделей турбулентности и вязкости) проведено численное исследование поведения полусферического возмущения на контактной границе двух сред, одна из которых много тяжелее другой. Зона турбулентного перемешивания в задаче формируется вследствие фоновых возмущений контактной границы, заданных в начальный момент времени. Получены закономерности роста отдельных возмущений контактной границы на фоне развития турбулентного перемешивания. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с результатами соответствующих экспериментов Невмержицкого и др.

*Ключевые слова:* неустойчивость Рэлея—Тейлора, зона турбулентного перемешивания, локальное возмущение, прямое численное моделирование, методика ЭГАК.

#### Введение

Турбулентная стадия развития неустойчивости Рэлея—Тейлора (НРТ) является одним из наиболее сложных и в то же время важных гидродинамических процессов. Исследованию данного процесса посвящено множество теоретических и экспериментальных работ. Эта задача рассматривалась и численно (см., например, [1—8]).

Теоретически рассматриваемое течение выходит на автомодельный режим. Для автомодельности требуется, чтобы в течении реализовалось развитое турбулентное перемешивание, т. е. чтобы в нем присутствовали представительный спектр вихрей и полномасштабный инерционный интервал.

В течение многих лет исследователи обсуждают проблему определения значения константы  $\alpha_b$  для линейного (относительно пройденного контактной границей (КГ) пути) закона роста "пузырей" на автомодельной стадии. У разных авторов оно разное (разброс данных составляет 0,015—0,075), при этом больше всего отличаются друг от друга расчетные и экспериментальные данные.

Вторая проблема связана с вопросами, когда происходит выход течения на автомодельную стадию и какова скорость роста ширины зоны турбулентного перемешивания (ЗТП) до выхода на нее. Анализ экспериментальных данных в [9] и численных расчетов в работах [7, 8] показывает, что на начальном участке течения число Рейнольдса (в численных расчетах схемное число Рейнольдса, определяемое схемной вязкостью) недостаточно велико и автомодельность отсутствует. Поэтому константа  $\alpha_b$  может быть корректно определена лишь при достижении достаточно большого числа Рейнольдса. Формально  $\alpha_b$ , определяемая по наклону кривой  $\sqrt{L}(t)$ , на начальном участке больше, чем на автомодельном, и уменьшается со временем. Некоторые авторы включают начальный участок течения в зону автомодельности, при этом получая не совсем корректные данные по константе автомодельности [9]. Другие авторы считают, что начальные данные помнятся так долго, что теоретический автомодельный участок течения вообще не наступает или наступает с другими значениями константы  $\alpha_b$  [2, 10]. В этих работах численно получено, что  $\alpha_b$  зависит от начального спектра возмущений КГ. Отметим также работу [11], в которой отрицается зависимость автомодельной константы от начального спектра возмущений и получено очень хорошее согласие с известными экспериментальными данными. В целом в настоящее время все же превалирует мнение, что константа автомодельности в значительной степени зависит от спектра начальных возмущений.

В связи с наличием зависимости скорости роста ЗТП от начального спектра возмущений (даже если лишь на начальной стадии) интерес представляет также задача о влиянии на закономерности роста ЗТП локальных возмущений (ЛВ) КГ. Эта задача рассматривалась экспериментально и расчетно-теоретически в работах [12—16]. Представляет интерес также задача об обратном влиянии турбулентности на развитие ЛВ. В работе [14] проведены экспериментальные исследования указанной задачи на ранних этапах развития процесса.

Известно, что рост ЛВ на границе сильно разноплотных веществ (число Атвуда А ~ 1) в условиях неустойчивости Рэлея—Тейлора при постоянном ускорении *g* происходит по автомодельному закону [12]. При этом форма возмущения остается подобной, а размер возмущения пропорционален *gt*<sup>2</sup>. Согласно С. Ф. Гаранину [12] глубина проникновения легкого вещества в тяжелое в двумерном (2D) случае происходит по закону  $R_l \cong \beta \left( \frac{\rho_h - \rho_l}{\rho_h + \rho_l} \right) \frac{gt^2}{2}$ , где  $\beta \cong 0,27$  — константа, определяющая рост вершины "2D канавки". Константа роста, полученная в численных расчетах Гараниным, несколько отличается от аналитических значений и составляет  $\beta \cong 0,44$ .

Согласно этим результатам при условии, что ЗТП состоит из множества независимых 2D ЛВ, скорость ее роста должна быть около 0,3, но этого не наблюдается в экспериментах. Причина — взаимодействие пузырей внутри ЗТП, которое уменьшает скорость роста ЛВ. В этом случае (при взаимодействии) ЛВ поглощаются турбулентной зоной, они фактически и формируют ЗТП.

Интерес представляет вопрос о влиянии ЗТП на рост ЛВ. Если подобное влияние имеется, то

ситуация значительно усложняется. Рассмотрению данной задачи посвящено небольшое количество публикаций. Первые экспериментальные и расчетные исследования были проведены в работе [13]. Более представительные экспериментальные исследования проведены в работе [14], в которой данное течение было исследовано на ранней стадии развития ЛВ, что позволило сделать вывод о значительном влиянии ЗТП на развитие ЛВ. В работе [15] экспериментальное исследование было продолжено на существенно более длительные времена, что позволило выявить закономерности развития ЛВ по отношению к ЗТП на поздних стадиях их развития. Расчетнотеоретическое исследование задачи на ранних этапах, т. е. повторение работы [14], было проведено в работе [16], и в этой работе были подтверждены основные выводы экспериментального исследования. Из сказанного следует, что в случае наличия лишь одного ЛВ, отличающегося от множества начальных фоновых возмущений, формирующих турбулентную зону, возможны следующие варианты:

- 1. ЛВ независимо от начальной амплитуды постепенно поглощается турбулентной зоной.
- 2. В зависимости от соотношения амплитуд ЛВ и фоновых возмущений реализуются режимы с различными значениями  $\beta$ , которые в частном случае (при  $\beta = \text{const}$ ) могут быть автомодельными.

Основной результат, полученный в экспериментах [15], — то, что ЗТП не поглощает ЛВ, а снижает постоянную его автомодельного роста в зависимости от начальных условий. При этом на поздних стадиях процесса скорости роста ЛВ приближаются к скорости роста ЗТП. В 2D расчетах работы [16] вывод о том, что ЗТП не поглощает ЛВ, а лишь снижает скорость его роста, нашел полное подтверждение. Однако этот вывод был сделан при двух допущениях: во-первых, исследование носило 2D характер; во-вторых, рассматривался лишь начальный этап развития ЛВ.

Данная работа является попыткой численного исследования взаимодействия ЛВ с ЗТП на достаточно поздних этапах развития процесса, позволяющего выявить закономерности развития ЛВ по отношению к ЗТП на этих стадиях, т. е. задачи, экспериментально исследованной в работе [15]. Численные исследования проводились по методике ЭГАК [17] (без моделей турбулентности и без учета молекулярной вязкости) в 2D и трехмерной (3D) постановках. Однако, справедливости ради, необходимо отметить, что для поздней стадии развития процесса проведение расчетов в 2D геометрии не имеет особого смысла по той причине, что на поздних стадиях 2D возмущения не сохраняют свою форму из-за развития турбулентного перемешивания на границе такого ЛВ.

Автор благодарен Г. С. Фирсовой (безвременно ушедшей), которая выполнила большинство из приведенных в данной работе расчетов по методике ЭГАК.

#### Постановка задач и расчетов

По постановке задачи близки к тем, что были исследованы в работе [15]. На рис. 1, *а* представлена начальная геометрия 2D задачи, а на рис. 1,  $\delta$  — 3D задачи.

В области 30 см < x < 60 см задано вещество с плотностью  $\rho_{\rm T} = 1,0$  г/см<sup>3</sup>, а в области  $x \leq 30$  см задано вещество с плотностью  $\rho_{\pi} = 0,01$  г/см<sup>3</sup>; -36 см  $\leq y \leq 36$  см, -36 см  $\leq z \leq 36$  см. Число Атвуда A  $\approx 1$ . В 2D случае третье направление отсутствует.

Сетка квадратная (2D) или кубическая (3D). Размер ячейки в интересующей области h = 0,5 мм. Общее число счетных ячеек в 3D задаче  $1440 \times 1440 \times 1200 \approx 2,5 \cdot 10^9$ . ЗТП формировалась от начальной возмущенной зоны на КГ. Начальные фоновые возмущения для инициирования турбулентного перемешивания задавались заменой ~ 30% пограничных ячеек тяжелой области на легкое вещество. Распределение задавалось с использованием датчика случайных чисел. Таким образом, начальная ширина ЗТП составляла  $R_{turb0} = 0,5$  мм (рис. 2).

К случайным начальным возмущениям добавлялось ЛВ в виде круглой цилндрической канавки радиусом  $R_{l0}$  в центре линии КГ в 2D случае и полусферы радиусом  $R_{l0}$  в центре плоскости



Рис. 1. Начальная геометрия задач: a - 2D;  $\delta - 3D$ 



Рис. 2. Начальные возмущения на КГ

КГ в 3D случае (см. рис. 2). Эта выемка делалась в тяжелом веществе и заполнялась легким веществом. Радиусы возмущения  $R_{l0} = 2,5; 3,5;$  4; 5 мм.

Введем в рассмотрение удобную для дальнейшего использования относительную амплитуду ЛВ  $\tilde{R}_{l0} = R_{l0}/R_{turb0}$ .

#### Результаты 2D расчетов

На рис. 3, 4 показаны конфигурации системы на различные моменты времени (вместо времени указан пройденный путь  $S = gt^2/2$ ) в расчетах с  $R_{l0} = 2,5 \text{ мм} \left( \widetilde{R}_{l0} = 5 \right), R_{l0} = 3,5 \text{ мм} \left( \widetilde{R}_{l0} = 7 \right),$  $R_{l0} = 4 \text{ мм} \left( \widetilde{R}_{l0} = 8 \right)$  и  $R_{l0} = 5 \text{ мм} \left( \widetilde{R}_{l0} = 10 \right).$ На рис. 5 приводятся зависимости глубины

па рис. 5 приводятся зависимости глубины проникания пузырей легкого газа в тяжелый L(S) и амплитуды ЛВ R(S).

Прежде всего отметим, что скорость роста глубины проникания L(S) легкого вещества в тяжелое в ЗТП в зависимости от пройденного пути после некоторого переходного этапа ( $S \leq 30$  мм) выходит на постоянное значение, что является необходимым условием автомодельного режима течения. Граница фронта проникания определяется по уровню объемной доли легкого газа 0,09. Значение скорости  $\alpha_b \approx 0,1$  на этом участке такое же, как в задаче без ЛВ (данный расчет здесь не приводится). Это естественно, так как ЗТП определяется по ячейкам вне области, занятой ЛВ.

Как показано в работе [5], скорость роста пузыря с начальным радиусом 5 мм на начальном участке зависимости R(S) составляет  $\beta = \frac{dR}{dS} \approx \approx 0.3$ , что близко к константе роста, полученной Гараниным. Отметим, что в работе [5] исследо-

Ю. В. Янилкин



Рис. 3. Развитие 2D ЛВ и ЗТП: a - S = 2 мм;  $\delta - S = 8$  мм; e - S = 18 мм; слева направо  $- \widetilde{R}_{l0} = 5$ ;  $\widetilde{R}_{l0} = 7$ ;  $\widetilde{R}_{l0} = 8$ ;  $\widetilde{R}_{l0} = 10$ 





в

Рис. 4. Развитие 2D ЛВ и ЗТП: a-S=32 мм;  $\delta-S=50$  мм; s-S=72 мм; слева направо —  $\widetilde{R}_{l0}=5;$   $\widetilde{R}_{l0}=7;$   $\widetilde{R}_{l0}=8;$   $\widetilde{R}_{l0}=10$ 



Рис. 5. Зависимости от  ${\cal S}$ амплитуды и глубины проникания легкого вещества в тяжелое

вания проведены на моменты времени, когда пройденный путь составляет около S = 10 мм. Таким образом, на начальной стадии процесса ЗТП не оказывает заметного влияния на скорость роста ЛВ (в свою очередь, ЛВ, естественно, не оказывает никакого влияния на рост ЗТП)<sup>\*</sup>. Однако ситуация меняется с течением времени, а именно, при  $S \sim 20$  мм скорость роста ЛВ начинает уменьшаться, и при  $S \sim 50$  мм ЛВ поглощается ЗТП (см. рис. 4).

В остальных расчетах работы [5] скорость роста амплитуды ЛВ на начальном этапе постепенно уменьшается с уменьшением его начального радиуса, однако она заметно больше скорости проникания легкого вещества в тяжелое. С течением времени (при  $S \sim 15 \div 25$  мм) скорость начинает уменьшаться и ЛВ поглощается ЗТП.

Исключение составляет поведение ЛВ с амплитудой  $\tilde{R}_{l0} = 7$ : оно продолжает расти с большей скоростью, нежели ЗТП, до  $S \sim 60$  мм, и только после этого его скорость становится близкой к скорости роста ЗТП. Напрашивается вывод, что в этом расчете начальные фоновые возмущения таковы, что с течением времени они слились с ЛВ. В результате скорость роста возникшего более крупного пузыря оказывается выше скорости основных пузырей, создающих ЗТП.

Таким образом, численные исследования подтвердили результаты, полученные Гараниным. Однако автомодельный режим, полученный Гараниным с  $\beta = 0,3$ , в расчетах реализуется лишь на начальном этапе, причем только тогда, когда начальная амплитуда  $R_{l0}$  намного больше начальной амплитуды фоновых возмущений  $R_{turb0}$ , формирующих ЗТП. В случае, когда в начальный момент времени присутствуют ЛВ и возмущения, определяющие в дальнейшем ЗТП, реализуется множество автомодельных решений, в которых  $\beta$  является функцией отношения  $\tilde{R}_{l0}$ и  $\alpha_b < \beta < 0,3$ .

На поздней стадии ЛВ поглощается ЗТП или растет с такой же скоростью, что и ЗТП, однако время наступления этой стадии зависит как от начального ЛВ, так и от спектра фоновых возмущений на КГ, которые сложным образом взаимодействуют с ЛВ. Отметим еще раз, что эти результаты получены для 2D возмущений по 2D методике. Экспериментально такие течения не реализуются, так как любое 2D возмущение с течением времени покрывается 3D возмущениями и развитие как фоновых возмущений, так и ЛВ происходит 3D образом.

#### Результаты 3D расчетов

На рис. 6, 7 показаны конфигурации системы на несколько моментов времени в расчетах с  $\tilde{R}_{l0} = 10$ ,  $\tilde{R}_{l0} = 8$ ,  $\tilde{R}_{l0} = 6$ ,  $\tilde{R}_{l0} = 5$ . Видно, как со временем в ЗТП происходит объединение вихрей и увеличение их размеров. Аналогично увеличиваются и размеры ЛВ, однако при меньших размерах скорость роста уменьшается.

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>В настоящей работе начальная стадия процесса не исследовалась.



Рис. 6. Картины ЛВ и ЗТП на различные моменты времени при  $\widetilde{R}_{l0} = 10$  (слева) и  $\widetilde{R}_{l0} = 8$  (справа): a - S = 2 мм;  $\delta - S = 8$  мм;  $\epsilon - S = 18$  мм;  $\epsilon - S = 32$  мм;  $\delta - S = 50$  мм



Рис. 7. Картины ЛВ и ЗТП на различные моменты времени при  $\widetilde{R}_{l0} = 6$  (слева) и  $\widetilde{R}_{l0} = 5$  (справа): a - S = 2 мм;  $\delta - S = 8$  мм; e - S = 18 мм; e - S = 32 мм;  $\partial - S = 50$  мм

На рис. 8, 9 показано развитие ЛВ на различные моменты времени в проекции y = const, проходящей через начальный центр ЛВ. Эти рисунки наглядно демонстрируют отмеченные выше закономерности.

Из рис. 6—9 видно, что ЛВ растет сначала в виде полусферической выемки, увеличиваясь в ширину и высоту, а со временем принимает различную форму в зависимости от своих начальных размеров.

Интегральные данные по расчетам приводятся на рис. 10 в виде зависимостей R(S) амплитуды ЛВ от пройденного пути. Как и в 2D задаче, скорость роста глубины проникания L(S) легкого вещества в тяжелое в ЗТП в зависимости от пройденного пути после некоторого переходного этапа ( $S \leq 30$  мм) выходит на постоянное значение  $\alpha_b \approx 0,11$ , что является необходимым условием автомодельного режима течения.

Как показано в работе [5], в расчетах скорость роста пузыря с начальным радиусом 5 мм на начальном участке зависимости R(S) составляет  $\beta = \frac{dR}{dS} \approx 0.6$ . На этой стадии процесса ЗТП не оказывает заметного влияния на скорость роста 3D ЛВ (в свою очередь, ЛВ, естественно, не оказывает никакого влияния на рост ЗТП). Однако ситуация меняется с течением времени: уже при  $S \sim 5 \div 10$  мм скорость роста ЛВ начинает уменьшаться и при  $S \sim 25 \div 30$  мм принимает значение  $\beta \approx 0.35$ , которое не меняется до окончания расчета (см. рис. 10).

В остальных расчетах работы [5] скорость роста амплитуды ЛВ на начальном этапе постепенно уменьшается с уменьшением его начального радиуса, однако она существенно больше скорости проникания легкого вещества в тяжелое в ЗТП. С течением времени уже при  $S \sim 5 \div 10$  мм скорость роста ЛВ начинает уменьшаться и при  $S \sim 25 \div 30$  мм принимает значение, которое не меняется до окончания расчета (см. рис. 10). При этом значение этой постоянной скорости коррелирует с начальным размером ЛВ.

#### Обсуждение результатов и выводы

Как в 2D, так и 3D задачах скорость роста  $\alpha_b$  глубины проникания L(S) легкого вещества в тяжелое в ЗТП в зависимости от пройденного пути после некоторого переходного этапа выходит на постоянное значение, что является необходимым условием автомодельного режима течения. В 2D задаче  $\alpha_b \approx 0,1$ , в 3D задаче  $\alpha_b \approx 0,11$ . Бли-

зость этих значений свидетельствует о том, что основные закономерности турбулентности в ЗТП корректно моделируются и в 2D приближении.

Качественно поведение ЛВ похоже в 3D и 2D случаях. На начальном этапе процесса ЛВ растут с существенно большими скоростями по сравнению с ростом ЗТП. Затем скорость начинает уменьшаться, и начиная с какого-то момента времени рост ЛВ продолжается с некоторой постоянной скоростью, причем время выхода на этот режим не сильно зависит от начального размера ЛВ. Принципиальная разница в поведении ЛВ заключается в том, что в 2D случае эта скорость совпадает со скоростью ЗТП, и это означает, что ЗТП поглощает ЛВ, а в 3D случае — заметно превышает, поглощения не происходит. Конечно, этот вывод справедлив для моментов времени, достигнутых в проведенных расчетах. Дальнейшее поведение ЛВ необходимо исследовать в существенно больших геометриях, что требует огромных машинных ресурсов.

В заключение рассмотрим результаты расчетов в сравнении с экспериментальными данными [14, 15]. Прежде всего отметим, что в серии экспериментов [14] для инициализации турбулентности задавалось фоновое возмущение КГ с амплитудой около 0,25 мм, т. е. оно имело размеры одной счетной ячейки в расчетах. Таким образом, фоновые возмущения КГ в экспериментах и расчетах имели один и тот же размер. Однако в этой серии экспериментов, во-первых, радиусы ЛВ менялись в пределах 0,5—3 мм и, вовторых, данные получены только для начального этапа процесса. В рассматриваемой же здесь серии экспериментов [15] начальные возмущения не задавались, возмущения получались естественным путем от имеющихся неоднородностей на УВ или по каким-то другим причинам. Поэтому при сравнении результатов надо иметь в виду, что с точки зрения начальных данных расчеты и эксперименты отличаются. Наличие достаточно больших с точки зрения ЛВ фоновых возмущений приводит к более сильному взаимодействию их с ЛВ и соответственно уменьшению скорости роста ЛВ.

На рис. 11 приводятся расчетные зависимости скорости роста на начальном линейном участке (до  $S \sim 10$  мм) от соотношения амплитуд ЛВ и фоновых возмущений (рисунок воспроизводится по работе [14]). На этом же рисунке приводятся экспериментальные данные. Видно достаточно хорошее согласие расчетов и экспериментов между собой.



Рис. 8. Развитие ЛВ с  $\tilde{R}_{l0} = 10$  (a-e) и  $\tilde{R}_{l0} = 8$  (r-e): a-S = 18 мм; b-S = 40,5 мм; e-S = 60,5 мм; r-S = 18 мм;  $\partial - S = 40,5$  мм; e-S = 60,5 мм; r-S = 18 мм;  $\partial - S = 40,5$  мм; e-S = 60,5 мм



Рис. 9. Развитие ЛВ с  $\tilde{R}_{l0} = 6$  (a, b) и  $\tilde{R}_{l0} = 5$  (e, e): a - S = 18 мм; b - S = 40,5 мм; e - S = 18 мм; e - S = 40,5 мм



Рис. 10. Расчетные зависимости амплитуды ЛВ и глубины проникания легкого вещества в тяжелое в ЗТП



Рис. 11. Зависимости скорости роста амплитуды ЛВ от  $\widetilde{R}_{l0}$  на начальной стадии: — расчет;  $\mathbf{I}$  — эксперимент

На рис. 12 приведены экспериментальные зависимости из работы [15] амплитуды ЛВ от удвоенного пройденного расстояния. Там же приводятся зависимости глубины проникания легкого вещества в тяжелое в ЗТП.

На рис. 13 приводятся значения скоростей роста ЛВ на втором этапе процесса: от S = 10 мм до S = 80 мм (по рис. 12). Согласие можно считать удовлетворительным, если иметь в виду, что экспериментальные данные снимались по трем точкам рис. 12, точность определения которых невысока. На рис. 13 приведены также погрешности, полученные по крайним точкам



Рис. 12. Развитие амплитуды ЛВ и глубины проникания легкого вещества в тяжелое в ЗТП (эксперименты [15], фрагмент):  $\bullet - R_{l0} = 3 \text{ мм}; \blacksquare - R_{l0} = 6 \text{ мм};$  $\bullet - R_{l0} = 6 \text{ мм}; \blacktriangle - R_{l0} = 2 \text{ мм}; \divideontimes -$ глубина проникания ЗТП (результаты двух экспериментов); I погрешность



Рис. 13. Зависимости скорости роста амплитуды ЛВ от *R*<sub>l0</sub> на второй стадии процесса: – $\Delta$ – – расчет; = – эксперимент; I – погрешность

указанных экспериментальных погрешностей на рис. 12 (данные снимались с оригинального рисунка из [5]). Отметим, что скорость роста глубины проникания легкого вещества в тяжелое в ЗТП согласуется с рис. 11 и составляет ~ 0,11.

#### Заключение

В работе с использованием методики ЭГАК проведено численное моделирование развития ЛВ на КГ двух сред с числом Атвуда А ~ 1 на фоне развития ЗТП, возникающей при ускорении КГ в поле тяжести. Проведены 2D и 3D расчеты задачи, когда в начальный момент времени на КГ присутствуют как ЛВ, так и фоновые возмущения, определяющие в дальнейшем развитие ЗТП.

На начальном (первом) этапе развития процесса рост амплитуды ЛВ происходит по тому же квадратичному (относительно пройденного пути) закону, что и для ЗТП. Однако константа автомодельности меняется в зависимости от соотношения амплитуд ЛВ и фоновых возмущений. Это означает, что реализуется множество автомодельных решений для роста амплитуды ЛВ. Скорость роста в 2D случае меняется от 0,3 до 0,1, в 3D — от 0,6 до 0,1. Этот результат был получен ранее как экспериментально [14], так и численно [16]. В настоящей работе рассмотрены существенно более поздние времена. На втором этапе скорость роста ЛВ замедляется и выходит на другое постоянное значение (в зависимости от пройденного пути), которое до значений 5-6 мм коррелирует с начальной амплитудой ЛВ, однако при амплитудах около 6 мм перестает зависеть от нее. На третьем этапе в 2D случае скорость роста ЛВ становится близкой к скорости роста ЗТП и ЗТП поглощает ЛВ или ЛВ движется с такой же скоростью, становясь частью зоны. В 3D случае ЛВ растет с большей скоростью по сравнению со скоростью роста ЗТП на обоих этапах, но все же на первом этапе превышение скорости роста значительно больше. Вопрос о том, происходит ли слияние ЛВ и ЗТП, остался открытым как в экспериментальных, так и численных работах. Во всяком случае в рассмотренные промежутки времени такое слияние не наблюдается.

Время перехода с первого этапа на второй в расчетах определяется как отношением амплитуд ЛВ к фоновым возмущениям, так и спектром фоновых возмущений.

В расчетах не рассматривались режимы течения, возникающие при взаимодействии ЛВ друг с другом, что в конце концов должно приводить к автомодельному режиму развития ЗТП с  $\alpha_b \approx 0,11$ . Это должно произойти, когда ширина ЗТП во много раз превысит размер максимальных начальных возмущений и расстояний между этими ЛВ.

Таким образом, показано, что если при развитии турбулентного перемешивания на КГ имеются ЛВ, то они в значительной степени могут исказить скорость роста ширины ЗТП в сторону увеличения. На начальной стадии процесса масштабы увеличения скорости коррелируют как с размерами ЛВ, так и с их формой (2D или 3D). Однако на более поздних стадиях их поведение неконтролируемо и зависит от размеров ЛВ и продолжительности развития процесса. Это обстоятельство необходимо иметь в виду при экспериментальных измерениях ширины ЗТП.

### Список литературы

 Анучина Н. Н., Кучеренко Ю. А., Неуважаев В. Е. и др. Турбулентное перемешивание на ускоряющейся границе разноплотных жидкостей // МЖГ. 1978. № 6. С. 157—160. Anuchina N. N., Kucherenko Yu. A., Neuvazhaev V. E. i dr. Turbulentnoe peremeshivanie na uskoryayushcheysya granitse raznoplotnykh zhidkostey // MZhG. 1978. N 6. S. 157—160.

- Youngs D. L. 3D numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability // Phys. Fluids. 1991. Vol. A3(5). P. 1312-1319.
- Dimonte G., Youngs D. L., Dimits A. et al. A comparative study of the turbulent Rayleigh— Taylor instability using high-resolution threedimensional numerical simulations: The Alpha-Group collaboration // Ibid. 2004. Vol. 16, No 5. P. 1668—1693.
- Stadnik A. A., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V., Zhmailo V. A. Direct numerical simulation of gravitational turbulent mixing // 5rd Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. Stony Brook, USA, 1995.
- 5. Жмайло В. А, Стадник А. Л., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Прямое численное моделирование гравитационного турбулентного перемешивания // Вопросы атомной науки и техники. Cep. Теоретическая и прикладная физика. 1996. Вып. 1—2. C. 29-37. Zhmaylo V. A., Stadnik A. L., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V. Prvamoe chislennoe modelirovanie gravitatsionnogo turbulentnogo peremeshivaniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya
- Sin'kova O. G., Stadnik A. L., Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V., Zhmailo V. A. Threedimensional direct numerical simulation of gravitational turbulent mixing // Proc. 6th Int. Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing. Marseille, France, 1997. P. 470-479.

fizika. 1996. Vyp. 1-2. S. 29-37.

- Yanilkin Yu. V., Statsenko V. P., Rebrov S. V., Sinkova O. G., Stadnik A. L. Study of gravitational turbulent mixing at large density differences using direct 3D numerical simulation // 8th Int. Seminar on Turbulent Mixing of Compressible Matter (8th IWPCTM). Pasadena, USA, 2001.
- 8. Янилкин Ю. В., Стаценко В. П., Ребров С. В., Синькова О. Г., Стадник А. Л. Исследование гравитационного турбулентного перемешивания при больших разноплотностях с помощью прямого трехмерного численного моделирования // Вопросы атомной науки и техники. Сер.

Математическое моделирование физических процессов. 2002. Вып. 2. С. 3-9. *V*., V. Yanilkin Yu. Statsenko*P*., Rebrov S. V., Sinkova O. *G*., Stadnik A. L. Issledovanie gravitatsionnogo turbulentnogo peremeshivaniya pri bolshikh raznoplotnostyakh s pomoshchyu pryamogo trekhmernogo chislennogo modelirovaniva // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2002. Vyp. 2. S. 3-9.

 Кучеренко Ю. А., Шестаченко О. Е., Пискунов Ю. А., Свиридов Е. В., Медведев В. Н., Байшев А. И. Экспериментальные исследования автомодельного режима перемешивания разноплотных газов в поле тяжести Земли // Тез. докл. Межд. конф. "Забабахинские науч. чтения". Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2001. С. 108.

Kucherenko Yu. A., Shestachenko O. *E*.. A., *V*., Piskunov Yu. Sviridov E. Medvedev V. Ν., Bayshev Α. Ι. Eksperimentalnye issledovaniya avtomodelnogo rezhima peremeshivaniya raznoplotnykh gazov v pole tyazhesti Zemli // Tez. dokl. konf. "Zababakhinskie nauch. Mezhd. chteniya". Snezhinsk: RFYaTs-VNIITF, 2001. S. 108.

- Kuchugov P., Zmitrenko N., Rozanov V., Yanilkin Yu. The evolution model of Rayleigh—Taylor instability development // J. of Russian Laser Research. 2012. Vol. 33, No 6. P. 517—530.
- Glimm J., Sharp D. H., Kaman T., Lim H. New directions for Rayleigh-Taylor mixing // Philisophical Transactions of the Royal Society A. 2013. Vol. 371, No 2003. P. 20120183.
- 12. Гаранин С. Φ. Автомодельное развитие неустойчивости Рэлея—Тейлора в районе угловых точек // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1994/95. Вып. 3/1. С. 12—17. Garanin S. F. Avtomodelnoe razvitie neustoychivosti Releya—Teylora v rayone uglovykh tochek // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 1994/95. Vyp. 3/1. S. 12—17.
- 13. Волченко О. И., Жидов И. Г., Невмержицкий Н. В., Рогачёв В. Г. Развитие локализованных возмущений на неустойчивой границе ускоряемого слоя // Письма в

ЖТФ. 1989. Т. 15. Вып. 1. С. 47—50. Volchenko O. I., Zhidov I. G., Nevmerzhitskiy N. V., Rogachev V. G. Razvitie lokalizovannykh vozmushcheniy na neustoychivoy granitse uskoryaemogo sloya // Pisma v ZhTF. 1989. Т. 15. Vyp. 1. S. 47—50.

14. Сотсков Е. А., Невмержицкий Н. В., Мешков Е. Е., Близнецов М. В., Дреннов А. О., Сеньковский Е. Д. Исследование развития локального возмущения и его взаимодействия с зоной турбулентного перемешивания на границе газ—студень // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2003. Вып. 1—2. С. 57—59.

Sotskov E. A., Nevmerzhitskiy N. V., Meshkov E. E., Bliznetsov M. V., Drennov A. O., Senkovskiy E. D. Issledovanie razvitiya lokalnogo vozmushcheniya i ego vzaimodeystviya s zonoy turbulentnogo peremeshivaniya na granitse gaz—studen // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 2003. Vyp. 1—2. S. 57—59.

- 15. Невмержицкий Н. В., Сотсков Е. *A*.. Сеньковский Е. Д., Кривонос О. Л., Калмыков А. В., Половников А. А., Левкина Е. В., Мармышев В. В., Фролов С. В., Абакумов С. А. Развитие локального возмущения на границе газ-жидкость при неустойчивости Рэлея—Тейлора // Tp. межд. конф. "XIII Харитоновские тематические науч. чтения". Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2011. С. 587—591. Nevmerzhitskiy N. V., Sotskov E. Α., Krivonos Senkovskiy E. D., О. L., Kalmykov A. *V*., Polovnikov Α. A., Levkina E. V., Marmyshev V. V., Frolov S. V., Abakumov S.Α. Razvitie lokalnogo vozmushcheniya na granitse gaz-zhidkost pri neustoychivosti Releya—Teylora // Tr. mezhd. konf. "XIII Kharitonovskie tematicheskie nauch. chteniya". Sarov: FGUP "RFYaTs-VNIIEF", 2011. S. 587-591.
- 16. Раевский В. А., Синицына С. Н., Янилкин Ю. В. Численное моделирование влияния зоны турбулентного перемешивания на рост локального возмущения в условиях неустойчивости Рэлея—Тейлора // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2003. Вып. 1—2. С. 28—33.

Raevsky V. A., Sinitsyna S. Ν., Yanilkin Yu. V. Chislennoe modelirovanie vlivaniya zony turbulentnogo peremeshivaniya na rost lokalnogo vozmushcheniya v usloviyakh neustovchivosti Releva—Teylora // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 2003.Vyp. 1–2. S. 28–33.

 Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А., Гаврилова Е. С., Гончаров Е. А., Горбенко А. Д., Городничев А. В., Губков Е. В., Гужова А. Р., Дегтяренко Л. И., Жарова Г. В., Колобянин В. Ю., Софронов В. Н., Стадник А. Л., Ховрин Н. А., Чернышова О. Н., Чистякова И. Н., Шемяков В. Н. Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54-65. Yanilkin Yu. *V*., Belyaev S. *P*.. A., E. *S*.. Bondarenko Yu. Gavrilova Goncharov E. A., Gorbenko Α. D., Gorodnichev *V*., Gubkov E. Α. *V*., Guzhova Α. Deqtyarenko L.*R*., I., Zharova G. *V*., Kolobyanin V. Yu., Sofronov V. N., Stadnik A. L., Khovrin N. A., Chernyshova O. N., Chistyakova I. N., Shemyakov V. N.Eylerovy chislennye metodiki EGAK i TREK dlya modelirovaniya mnogomernykh techeniy mnogokomponentnoy sredy // Trudy RFYaTs-VNIIEF. Sarov: RFYaTs-VNIIEF. 2008. Vyp. 12. S. 54-65.

#### Статья поступила в редакцию 18.02.19.

# NUMERICAL STUDY OF THE INTERRELATION OF TURBULENT MIXING AREA AND LOCAL DISTURBANCES OF INTERFACE IN THE GRAVITATIONAL TURBULENT MIXING PROBLEM / Yu. V. Yanilkin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod Region).

The paper discusses the numerical simulation of a separate local disturbance in the turbulent mixing area generated due to the Rayleigh—Taylor instability with a permanently accelerating interface between two gases of different densities. The direct 3D numerical simulation using the EGAK code (without models of turbulence and viscosity) was performed to study the behavior of a semispherical disturbance on an interface of two media, with one of them being significantly heavier than the other. The turbulent mixing area in this problem is generated due to the background disturbances of the interface specified at initial time. Regularities in separate disturbances of the interface growing against the background of developing turbulent mixing have been found. The calculated results are in a good agreement with results of experiments by Nevmerzhitskiy et al.

*Keywords*: Rayleigh—Taylor instability, turbulent mixing area, local perturbation, direct numerical simulation, the EGAK code.

УДК 517.958:536.2

# РАЗНОСТНАЯ СХЕМА "УРАЛ" ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ *Р*<sub>1</sub>-УРАВНЕНИЙ

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

Вопросы построения монотонных разностных схем при решении уравнения переноса теплового излучения в  $P_1$ -приближении рассматриваются во многих работах. В данной работе предложена новая разностная схема, улучшающая монотонность решения при аппроксимации гиперболических уравнений. Для этого используется методология построения диссипативных схем для системы  $P_1$ -уравнений, записанной в инвариантах Римана. Особенностью новой схемы является учет функции Планка в соотношениях, связывающих значения интегральных средних величин со значениями величин в узлах разностных интервалов.

Ключевые слова: уравнение переноса в P<sub>1</sub>-приближении, разностная схема.

#### Введение

При решении уравнения переноса теплового излучения используются различные приближения углового распределения в пространстве направлений полета частиц. Это связано с тем, что потери энергии вещества на излучение в явной форме не зависят от углового распределения излучения и определяются только интегральными по направлениям величинами: плотностью излучения и потоком. Угловое распределение излучения можно представить в виде разложения в ряд по сферическим гармоникам, который в плоской и сферической геометриях сводится к ряду по полиномам Лежандра. Сферические функции образуют полную систему, поэтому с этим разложением не связано никаких приближений. Но на практике приходится ограничиваться в разложении конечным числом членов, поэтому полученный результат называют  $P_n$ -приближением, если разложение прерывается на (n + 1)-м члене. Обычно угловое распределение теплового излучения хорошо описывается уже двумя первыми полиномами Лежандра, которые сводят решение уравнения переноса к гиперболической системе  $P_1$ -уравнений.

Если пренебречь временной производной по потоку, то гиперболическая система переходит в параболическую систему, для которой было предложено использовать разностную схему РОМБ [1—3]. В 1989 г. было предложено использовать эту схему и для решения гиперболической системы  $P_1$ уравнений [4—6]. Для разностной аппроксимации  $P_1$ -уравнений были доказаны устойчивость и сходимость схемы РОМБ [7, 8], а также выполнение асимптотического диффузионного предела [9, 10].

Схема РОМБ применялась также для решения более сложной гиперболической системы квазидиффузионных уравнений [11]. Однако в работах [12, 13] показано, что она может быть неустойчива в квазидиффузионном приближении, поэтому для таких уравнений предложена схема ГРОМ [14].

Одним из основных требований при использовании разностных схем для решения  $P_1$ -уравнений является получение неотрицательной плотности излучения и температуры вещества. Такие схемы обычно называют положительными. Возможность построения положительных схем в декартовых геометриях для системы уравнений переноса теплового излучения в  $P_1$ -приближении подтверждается выполнением принципа максимума—минимума для данной системы [15]. В криволинейных

геометриях (сферической, цилиндрической) принцип максимума—минимума доказать не удается, поэтому построение положительных схем сильно усложняется.

Одним из подходов для получения положительных схем является переход к нелинейным схемам, построенным с использованием TVD-технологии для повышения точности [16]. Доказательство принадлежности таких схем к TVD-схемам затруднено из-за применения линеаризации, поэтому такие схемы названы TVDR (Total Variation Diminishing Reconstruction). В работе [17] предложена TVDR-схема, основанная на TVD-реконструкции одномерной системы *P*<sub>1</sub>-уравнений, записанной в инвариантах Римана. В работе [18] исследован порядок численной сходимости этой схемы и по-казано, что на гладких решениях TVDR-схема имеет второй порядок, а на разрывных решениях и в неоднородных средах порядок снижается до первого. В работе [19] предложена одномерная TVDR-схема, которая использует TVD-реконструкцию не инвариантов, а искомых величин: плотности и потока излучения. Эта схема, в отличие от предыдущей, более проста в реализации и легче обобщается на многомерные геометрии. В работах [20—22] предложены двумерные TVDR-схемы, построенные на реконструкции плотности и потока излучения. Для квазидиффузионного приближения TVDR-схемы рассмотрены в работах [23, 24].

Вопросы построения не только положительных, но и монотонных разностных схем при решении уравнения переноса теплового излучения в P<sub>1</sub>-приближении рассматривались также в работах [25, 26], где сравнивались схемы POME, TVDR и схема, построенная по аналогии со схемой Годунова.

В данной работе предложен новый вариант схемы РОМБ, улучшающий монотонность разностной аппроксимации гиперболических уравнений. Для этого применяется методология построения диссипативных схем, используемая при аппроксимации уравнения переноса в работе [27]. Новая схема названа схемой УРАЛ. Особенностью новой схемы является учет функции Планка с данного шага, а плотности и потока излучения — как с данного, так и предыдущего шага в соотношениях, связывающих значения интегральных средних величин со значениями величин в узлах разностных интервалов. Приведены две модельные задачи: в первой моделируется перенос в вакууме для изучения монотонности решения с учетом в соотношениях связи плотности и потока с предыдущего шага, во второй — перенос в реальной среде для изучения влияния функции Планка в соотношениях связи на получаемое решение.

#### Постановка задачи

Рассмотрим гиперболическую систему уравнений переноса в *P*<sub>1</sub>-приближении для одномерной плоской геометрии:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} + \alpha_c U = \alpha_c B;$$

$$\frac{1}{c}\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{3}\frac{\partial U}{\partial x} + (\alpha_c + \alpha_s)S = 0.$$
(1)

Здесь t — время; U — плотность излучения, умноженная на скорость света c; S — поток энергии излучения;  $\alpha_s$  — коэффициент рассеяния;  $\alpha_c$  — коэффициент поглощения; B — равновесная плотность излучения, умноженная на скорость света.

Для решения системы (1) будем применять разностную аппроксимацию в пространстве  $t \in [0, \infty]$ ,  $x \in [-\infty, \infty]$ , используя методологию построения диссипативных схем.

#### Построение диссипативной схемы без учета рассеяния

Для начала построим схему второго порядка аппроксимации без учета рассеяния:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} + \alpha_c U = \alpha_c B;$$

$$\frac{1}{c}\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{3}\frac{\partial U}{\partial x} + \alpha_c S = 0.$$
(2)

Неявная разностная аппроксимация системы (2) в рамках одной ячейки имеет вид

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1} - U_{i+1/2}^n}{c\tau} + \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_i^{n+1}}{h} + (\alpha_c U)_{i+1/2}^{n+1} = (\alpha_c B)_{i+1/2}^{n+1};$$

$$\frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^n}{c\tau} + \frac{U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}}{3h} + (\alpha_c S)_{i+1/2}^{n+1} = 0,$$
(3)

где  $\tau = t^{n+1} - t^n$ ;  $h = x_{i+1} - x_i$ ;  $U_i^{n+1}$ ,  $S_i^{n+1}$  — значения величин в узлах разностной сетки;  $U_{i+1/2}^{n+1}$ ,  $S_{i+1/2}^{n+1}$  — значения интегральных средних величин на интервалах разностной сетки;  $i = \overline{0, I}$ . Для дальнейших исследований запишем разностную схему (3) в более компактном виде:

$$U_{i+1/2}^{n+1} + \frac{1}{q_{i+1/2}^{n+1}h} \Delta S_i^{n+1} = (F_0)_{i+1/2}^{n+1}; \qquad S_{i+1/2}^{n+1} + \frac{1}{3q_{i+1/2}^{n+1}h} \Delta U_i^{n+1} = (F_1)_{i+1/2}^{n+1},$$

где  $q_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{c\tau} + (\alpha_c)_{i+1/2}^{n+1}; \quad (F_0)_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{q_{i+1/2}^{n+1}} \left[ \frac{1}{c\tau} U_{i+1/2}^n + (\alpha_c B)_{i+1/2}^{n+1} \right]; \quad (F_1)_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{c\tau q_{i+1/2}^{n+1}} S_{i+1/2}^n;$  $\Delta (\Box)_i = (\Box)_{i+1} - (\Box)_i.$ 

Переходя в системе (3) к инвариантам  $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}U - S, \ \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}U + S, \ получаем$ 

$$\frac{(\psi_1)_{i+1/2}^{n+1} - (\psi_1)_{i+1/2}^n}{c\tau} - \frac{(\psi_1)_{i+1}^{n+1} - (\psi_1)_i^{n+1}}{\sqrt{3}h} + (\alpha_c\psi_1)_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\alpha_c B)_{i+1/2}^{n+1};$$

$$\frac{(\psi_2)_{i+1/2}^{n+1} - (\psi_2)_{i+1/2}^n}{c\tau} + \frac{(\psi_2)_{i+1}^{n+1} - (\psi_2)_i^{n+1}}{\sqrt{3}h} + (\alpha_c\psi_2)_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\alpha_c B)_{i+1/2}^{n+1}.$$
(4)

Систему уравнений (4) можно также записать в более компактном виде:

$$(\psi_1)_{i+1/2}^{n+1} - \lambda_{i+1/2}^{n+1} \Delta (\psi_1)_i^{n+1} = (Q_1)_{i+1/2}^{n+1}; \quad (\psi_2)_{i+1/2}^{n+1} + \lambda_{i+1/2}^{n+1} \Delta (\psi_2)_i^{n+1} = (Q_2)_{i+1/2}^{n+1}, \tag{5}$$

где 
$$\lambda_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{3}q_{i+1/2}^{n+1}h}; (Q_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{q_{i+1/2}^{n+1}} \left[ \frac{1}{c\tau} (\psi_{1,2})_{i+1/2}^n + \frac{1}{\sqrt{3}} (\alpha_c B)_{i+1/2}^{n+1} \right]$$

Если при численном решении уравнений системы (5) применять схемы второго порядка аппроксимации (например, DD-схему), то в зоне больших градиентов решения, а также в зоне больших оптических плотностей ( $\alpha h \gg 1$ ) появляются нефизичные осцилляции и может нарушаться положительность решения. Если же применять схемы первого порядка аппроксимации (например, St-схему), то отмеченные недостатки снимаются, но понижается точность решения, градиенты в решении могут быть чрезмерно размыты. С позиции метода дифференциального приближения нефизичные осцилляции в схемах второго порядка аппроксимации для оптически плотных систем можно объяснить наличием антидиссипативных членов в первом дифференциальном приближении. Для подавления этих осцилляций вводятся диссипативные члены, а схемы, построенные таким образом, называются диссипативными схемами (ДС-схемами).

Рассмотрим алгоритм построения ДС-схем на примере гиперболического уравнения в одномерной плоской геометрии

$$\frac{1}{c}\frac{\partial N}{\partial t} + \mu \frac{\partial N}{\partial x} + \alpha_c N = \frac{1}{2}\alpha_c B,\tag{6}$$

где  $N(t, x, \mu)$  — неотрицательная функция.

Разностная аппроксимация по времени уравнения (6) имеет вид

$$\mu \frac{\partial N^{n+1}}{\partial x} + q N^{n+1} = Q^{n+1},\tag{7}$$

где  $q = \frac{1}{c\tau} + \alpha_c; Q^{n+1} = \frac{1}{c\tau}N^n + \frac{1}{2}\alpha_c B^{n+1}.$ 

При аппроксимации уравнения (7) по пространству DD-схемой второго порядка с соотношениями  $N_{i+1/2} = 0.5 (N_i + N_{i+1}), Q_{i+1/2} = 0.5 (Q_i + Q_{i+1})$  получаем

$$\mu \frac{N_{i+1}^{n+1} - N_i^{n+1}}{h} + q \frac{N_i^{n+1} + N_{i+1}^{n+1}}{2} = \frac{Q_i^{n+1} + Q_{i+1}^{n+1}}{2}$$

Из разложения в ряд Тейлора находим невязку:

$$\mu \frac{\partial N}{\partial x} + qN - Q = -\frac{qh^2}{12} \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + O\left(h^3\right).$$

Антидиссипативное поведение остаточного члена  $-\frac{qh^2}{12}\frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$  в невязке вызвано отрицательным коэффициентом при второй производной. Особо негативно антидиссипация сказывается на решении в оптически плотной среде. Для устранения антидиссипации можно ввести искусственную диссипацию добавлением  $\frac{qh^2}{12}\frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$  в правую часть уравнения переноса (6). Таким образом, вместо гиперболического уравнения (6) получается параболическое уравнение с диссипативным оператором второго порядка в правой части. Естественно, решение параболического уравнения будет более гладким, чем решение гиперболического уравнения.

Для уменьшения погрешности аппроксимации величины Q вычитаем из правой части уравнения переноса (7) член  $\frac{h^2}{12} \frac{\partial^2 Q}{\partial r^2}$ , т. е. вместо уравнения (7) решаем уравнение

$$\mu \frac{\partial N^{n+1}}{\partial x} + qN^{n+1} = Q^{n+1} + \frac{qh^2}{12} \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2},\tag{8}$$

внося при этом ошибку второго порядка малости. Однако непосредственное решение (8) усложняется из-за появления производных второго порядка. Поэтому преобразуем уравнение (8) к виду системы уравнений первого порядка

$$\frac{1}{c}\frac{\partial N}{\partial t} + \mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha_c N = \frac{1}{2}\alpha_c B; \qquad \psi = N + \frac{\omega}{\mu},\tag{9}$$

где  $\psi\left(t,x,\mu\right)$ — диссипативная функция;  $\omega=\theta h\frac{\partial Q}{\partial x}-\delta h\frac{\partial N}{\partial x}$ — диссипативная добавка;  $\delta,~\theta$ — некоторые параметры.

Подставляя выражение для  $\psi$  в первое уравнение системы (9), получаем уравнение параболического типа

$$\frac{1}{c}\frac{\partial N}{\partial t} + \mu \frac{\partial N}{\partial x} + \alpha_c N = \frac{1}{2}\alpha_c B + \delta h \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \theta h \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}.$$
(10)

Выбирая параметры  $\delta$ ,  $\theta$  по формулам  $\delta = \frac{qh}{12}$ ,  $\theta = \frac{\delta}{q}$ , из аппроксимации уравнения (10) по времени получаем диссипативное уравнение (8).

Из вида диссипативной функции  $\psi$  можно получить выражение для N через  $\psi$ :

$$N = \psi - \frac{\omega}{\mu} = \psi + \frac{\delta h}{\mu} \frac{\partial N}{\partial x} - \frac{\theta h}{\mu} \frac{\partial Q}{\partial x} = \psi + \frac{\delta h}{\mu} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\theta h}{\mu} \frac{\partial Q}{\partial x} + O\left[ (\delta h)^2, (\theta h)^2 \right].$$

Если вместо этого уравнения использовать упрощенное выражение

$$N = \psi + \frac{\delta h}{\mu} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\theta h}{\mu} \frac{\partial Q}{\partial x},$$

то первое уравнение системы (9) будет справедливо с точностью до величин порядка  $O\left[(\delta h)^2, (\theta h)^2\right]$ .

Перейти к ДС-схемам для инвариантов можно, если выбирать соотношения связи в виде  $\psi_{1,2} = \psi_{1,2}^d \mp \frac{1}{\mu} \left( \delta h \frac{\partial \psi_{1,2}^d}{\partial x} - \theta q h \frac{\partial Q_{1,2}}{\partial x} \right)$ , где  $\mu = \frac{1}{\sqrt{3}}$ ;  $\psi_{1,2}^d$  — диссипативные инварианты.

Введем в систему для инвариантов (5) искусственную диссипацию. Заменим инварианты в узлах  $(\psi_{1,2})_i^{n+1}$  на диссипативные инварианты  $(\psi_{1,2}^d)_i^{n+1}$ :

$$(\psi_1)_{i+1/2}^{n+1} - \lambda_{i+1/2}^{n+1} \Delta \left(\psi_1^d\right)_i^{n+1} = (Q_1)_{i+1/2}^{n+1}; \quad (\psi_2)_{i+1/2}^{n+1} + \lambda_{i+1/2}^{n+1} \Delta \left(\psi_2^d\right)_i^{n+1} = (Q_2)_{i+1/2}^{n+1}. \tag{11}$$

Связь  $\psi_{1,2}$  с диссипативными инвариантами  $\psi_{1,2}^d$  зададим соотношениями

$$(\psi_{1})_{i+1/2} = (\psi_{1}^{d})_{i+1/2} - \tilde{\delta}\Delta (\psi_{1}^{d})_{i} + \gamma q \Delta (Q_{1})_{i}; (\psi_{2})_{i+1/2} = (\psi_{2}^{d})_{i+1/2} + \tilde{\delta}\Delta (\psi_{2}^{d})_{i} - \gamma q \Delta (Q_{2})_{i},$$

$$(12)$$

где  $\tilde{\delta} = \sqrt{3}\delta$ ,  $\gamma = \frac{\sqrt{3}\theta}{q}$  — коэффициенты искусственной диссипации;  $(\psi_{1,2}^d)_{i+1/2} = 0.5 \left[ (\psi_{1,2}^d)_i + (\psi_{1,2}^d)_{i+1} \right].$ 

Подставляя соотношения связи (12) в систему (11), получаем  $(\psi_1^d)_i = (\lambda^d + 0.5)^{-1} \left[ (\lambda^d - 0.5) (\psi_1^d)_{i+1} + (Q_1)_{i+1/2} - \gamma q \Delta (Q_1)_i \right]$ для счета по убыванию *i*;  $(\psi_2^d)_{i+1} = (\lambda^d + 0.5)^{-1} \left[ (\lambda^d - 0.5) (\psi_2^d)_i + (Q_2)_{i+1/2} + \gamma q \Delta (Q_2)_i \right]$ для счета по возрастанию *i*, где  $\lambda^d = \tilde{\delta} + \lambda$ .

При условиях

$$\lambda^{d} \ge 0.5; \quad (Q_{1})_{i+1/2} - \gamma q \Delta (Q_{1})_{i} \ge 0; \quad (Q_{2})_{i+1/2} + \gamma q \Delta (Q_{2})_{i} \ge 0$$
(13)

получаем положительную ДС-схему с  $\psi_{1,2}^d \ge 0$ . В дальнейшем знак "~" в параметре  $\tilde{\delta}$  для упрощения будем опускать.

Рассмотрим несколько примеров выбора параметров  $\delta$ ,  $\gamma$  в ДС-схемах. Если рассмотреть линейный случай с постоянным коэффициентом q, то при  $\delta = 0,5$  и  $(Q_{1,2})_i = 0,5 \left[ (Q_{1,2})_{i-1/2} + (Q_{1,2})_{i+1/2} \right]$  получаем

$$\begin{pmatrix} \psi_1^d \end{pmatrix}_i = (\lambda+1)^{-1} \left[ \lambda \left( \psi_1^d \right)_{i+1} + (0,5+\gamma q) (Q_1)_i + (0,5-\gamma q) (Q_1)_{i+1} \right]; \\ \left( \psi_2^d \right)_{i+1} = (\lambda+1)^{-1} \left[ \lambda \left( \psi_2^d \right)_i + (0,5-\gamma q) (Q_2)_i + (0,5+\gamma q) (Q_2)_{i+1} \right].$$

Отсюда при положительных граничных значениях  $(\psi_1^d)_I \ge 0, (\psi_2^d)_{i=0} \ge 0$ , положительных правых частях  $(Q_{1,2})_i \ge 0$  и  $-0.5 \le \gamma q \le 0.5$  получаем положительную ДС-схему для диссипативных инвариантов  $\psi_{1,2}^d \ge 0$ . Но это не гарантирует положительности для инвариантов  $\psi_{1,2} \ge 0$ , так как из соотношений связи получаем

$$(\psi_1)_{i+1/2} = \left(\psi_1^d\right)_i + \gamma q \Delta (Q_1)_i; \qquad (\psi_2)_{i+1/2} = \left(\psi_2^d\right)_{i+1} - \gamma q \Delta (Q_2)_i.$$

Положительную ДС-схему для инвариантов  $\psi_{1,2} \ge 0$  получаем только при  $\gamma = 0$ , но ДС-схема с параметрами  $\delta = 0.5$ ,  $\gamma = 0$  имеет первый порядок аппроксимации. Такая ДС-схема является диссипативным аналогом шаговой St-схемы первого порядка аппроксимации для уравнения переноса, но имеет более высокий порядок, так как в этой схеме для диссипативных инвариантов  $\psi_{1,2}^d$  используется схема второго порядка аппроксимации с соотношениями связи  $(\psi_{1,2}^d)_{i+1/2} = 0.5 \left[ (\psi_{1,2}^d)_i + (\psi_{1,2}^d)_{i+1} \right]$ , а

для инвариантов  $\psi_{1,2}$  — схема первого порядка с соотношениями связи  $(\psi_1)_{i+1/2} = (\psi_1^d)_i, (\psi_2)_{i+1/2} = (\psi_2^d)_{i+1}$ .

Если рассмотреть ДС-схему второго порядка аппроксимации с  $q = \text{const}, \ \delta = \frac{\sqrt{3}qh}{16}, \ \gamma = 0,$   $(Q_{1,2})_i = \frac{1}{2} \left[ (Q_{1,2})_{i-1/2} + (Q_{1,2})_{i+1/2} \right],$ то получаем  $(\psi_1^d)_i = (\lambda^d + 0.5)^{-1} \left[ (\lambda^d - 0.5) (\psi_1^d)_{i+1} + (Q_1)_{i+1/2} \right];$   $(\psi_2^d)_{i+1} = (\lambda^d + 0.5)^{-1} \left[ (\lambda^d - 0.5) (\psi_2^d)_i + (Q_2)_{i+1/2} \right];$   $(\psi_1)_{i+1/2} = (0.5 + \delta) (\psi_1^d)_i + (0.5 - \delta) (\psi_1^d)_{i+1};$   $(\psi_2)_{i+1/2} = (0.5 - \delta) (\psi_2^d)_i + (0.5 + \delta) (\psi_2^d)_{i+1},$ (14)

где  $\lambda^d \ge 0.5$ . Эта ДС-схема положительна для диссипативных инвариантов  $\psi_{1,2}^d$ , но при  $\delta = \frac{\sqrt{3}qh}{16} \ge 0.5$  может быть неположительной для  $\psi_{1,2}$ .

 $\geq 0,5$  может быть неположительной для  $\psi_{1,2}$ . Если рассмотреть схему с  $\delta = \frac{1}{2} \frac{1 + \exp(-\lambda^{-1})}{1 - \exp(-\lambda^{-1})} - \lambda$ ,  $\gamma = 0$ , то получаем положительную ДСсхему (14) для инвариантов  $\psi_{1,2}$  и  $\psi_{1,2}^d$ , так как  $\lambda^d \geq 0,5$ ,  $\delta \leq 0,5$ . Если использовать разложение  $\exp(-\lambda^{-1}) = 1 - \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{2\lambda^2} - \dots$  при  $\lambda > 1$ , то можно показать, что ДС-схема имеет второй порядок аппроксимации. При  $\lambda < 1$  также можно показать, что  $\delta \sim O(h)$ .

Если рассмотреть схему с  $\delta = \frac{1}{2} \frac{1 + \exp(-\lambda^{-1})}{1 - \exp(-\lambda^{-1})} - \lambda$ ,  $\gamma = \frac{\delta}{q}$ , то получаем положительную ДС-схему только для инвариантов  $\psi_{1,2}^d$  (инварианты  $\psi_{1,2}$  могут быть отрицательными):

$$\begin{split} \left(\psi_{1}^{d}\right)_{i} &= \left(\lambda^{d} + 0.5\right)^{-1} \left[ \left(\lambda^{d} - 0.5\right) \left(\psi_{1}^{d}\right)_{i+1} + \left(0.5 + \delta\right) \left(Q_{1}\right)_{i} + \left(0.5 - \delta\right) \left(Q_{1}\right)_{i+1} \right];\\ \left(\psi_{2}^{d}\right)_{i+1} &= \left(\lambda^{d} + 0.5\right)^{-1} \left[ \left(\lambda^{d} - 0.5\right) \left(\psi_{2}^{d}\right)_{i} + \left(0.5 - \delta\right) \left(Q_{2}\right)_{i} + \left(0.5 + \delta\right) \left(Q_{2}\right)_{i+1} \right];\\ \left(\psi_{1}\right)_{i+1/2} &= \left(0.5 + \delta\right) \left(\psi_{1}^{d}\right)_{i} + \left(0.5 - \delta\right) \left(\psi_{1}^{d}\right)_{i+1} + \delta\Delta \left(Q_{1}\right)_{i};\\ \left(\psi_{2}\right)_{i+1/2} &= \left(0.5 - \delta\right) \left(\psi_{2}^{d}\right)_{i} + \left(0.5 + \delta\right) \left(\psi_{2}^{d}\right)_{i+1} - \delta\Delta \left(Q_{2}\right)_{i}, \end{split}$$

где  $\lambda^d \ge 0.5; \, \gamma q = \delta \le 0.5.$ 

Так как эта схема близка по построению к схеме РОМБ, но отличается от последней более совершенными соотношениями связи, было предложено назвать ее схемой УРАЛ (Усовершенствованный Ромбовый АЛгоритм). В одномерном плоском случае схема УРАЛ для каждого в отдельности диссипативного инварианта является аналогом LC-схемы (линейной характеристической).

Из этих примеров видно, что в простейшем линейном случае с постоянным коэффициентом q при  $\gamma = 0$  можно построить безусловно положительные ДС-схемы для инвариантов  $\psi_{1,2}$  и  $\psi_{1,2}^d$  первого (при  $\delta = 0.5, \gamma = 0$ ) и второго (при  $\delta = \frac{1}{2} \frac{1 + \exp(-\lambda^{-1})}{1 - \exp(-\lambda^{-1})} - \lambda, \gamma = 0$ ) порядка аппроксимации по пространству.

Отличительной особенностью ДС-схем является то, что в таких схемах вместо исходной задачи относительно инвариантов  $\psi_{1,2}$ 

$$(\psi_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} \mp \lambda_{i+1/2}^{n+1} \Delta (\psi_{1,2})_i^{n+1} = (Q_{1,2})_{i+1/2}^{n+1}$$

решается подобная задача относительно диссипативных инвариантов  $\psi_{1,2}^d$ 

$$\left(\psi_{1,2}^{d}\right)_{i+1/2}^{n+1} \mp \left(\lambda^{d}\right)_{i+1/2}^{n+1} \Delta \left(\psi_{1,2}^{d}\right)_{i}^{n+1} = \left(\bar{Q}_{1,2}\right)_{i+1/2}^{n+1},$$

где  $\left(\bar{Q}_{1,2}\right)_{i+1/2}^{n+1} = (Q_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} \mp \gamma q \Delta (Q_{1,2})_i^{n+1}; (Q_{1,2})_i = 0.5 \left[ (Q_{1,2})_{i-1/2} + (Q_{1,2})_{i+1/2} \right].$ 

Несмотря на подобие исходных и диссипативных уравнений, между ними есть существенное различие. Переход в диссипативное пространство обеспечивает "прозрачность" среды за счет выполнения условия  $\sqrt{3}qh \leq 2$ . Таким образом, в диссипативном пространстве можно построить монотонные схемы второго порядка аппроксимации (например, использовать DD-схему). Однако это свойство не всегда сохраняется при переходе в исходное пространство для инвариантов  $\psi_{1,2}$ . Так, например, при  $\gamma = \delta = 0$  получаем положительное решение

$$\begin{pmatrix} \psi_1^d \end{pmatrix}_i = (\lambda + 0.5)^{-1} \left[ (\lambda - 0.5) \left( \psi_1^d \right)_{i+1} + (Q_1)_{i+1/2} \right] \ge 0;$$
  
$$\begin{pmatrix} \psi_2^d \end{pmatrix}_{i+1} = (\lambda + 0.5)^{-1} \left[ (\lambda - 0.5) \left( \psi_2^d \right)_i + (Q_2)_{i+1/2} \right] \ge 0;$$

только при услови<br/>и $\lambda = \frac{1}{\sqrt{3}qh} \ge 0,5$ или  $\sqrt{3}qh \le 2,$ что соответствует условию прозрачности среды.<br/> Для ДС-схем условие прозрачности среды  $\lambda^d \ge 0,5$  выполняется всегда при выборе параметра<br/>  $\delta$  в виде  $\delta = \frac{1}{K\lambda}$ , где K— некоторая положительная константа. Из условия положительности ДС-схем<br/>  $\lambda^d \ge 0,5$  получаем условие на выбор константы K:

$$\lambda^d - 0.5 = \lambda + \delta - 0.5 = \lambda + \frac{1}{K\lambda} - 0.5 \ge \left(\sqrt{\lambda} - \frac{1}{\sqrt{K\lambda}}\right)^2 \ge 0 \quad \text{при} \quad 0 < K \le 16.$$

Необходимым условием положительности инвариантов  $\psi_{1,2}^d$  в диссипативных уравнениях является неотрицательность правых частей  $(\bar{Q}_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} \ge 0$ . Условие  $(\bar{Q}_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} = (Q_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} \mp \gamma q \Delta (Q_{1,2})_i^{n+1} \ge 0$  можно записать в виде

$$(Q_{1,2})_{i+1/2} \mp 0.5\gamma q h^2 \Lambda (Q_{1,2}) \ge 0,$$

где  $\Lambda(Q_{1,2}) = \frac{1}{h^2} \left[ (Q_{1,2})_{i-1/2} - 2 (Q_{1,2})_{i+1/2} + (Q_{1,2})_{i+3/2} \right]$  — вторая разностная производная от правой части. Отсюда видно, что при ограниченной второй производной уменьшение пространственного шага (при  $h \to 0$ ) гарантирует выполнение условий положительности  $\psi_{1,2}^d$ . Если эти условия при крупных шагах не выполняются, то для обеспечения условий положительности ДС-схем можно использовать алгоритмы коррекции решения (нелинейные монотонизаторы). Такой подход улучшает монотонные свойства ДС-схем во всем диапазоне изменения оптической плотности. Можно использовать разные варианты построения монотонизаторов. Например:

- 1) при  $(\bar{Q}_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} < 0$  полагать  $(\bar{Q}_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} = 0;$
- 2) при  $(\bar{Q}_{1,2})_{i+1/2}^{n+1} < 0$  полагать  $\Delta (Q_{1,2})_i = 0$  или  $\gamma = 0;$
- 3) при  $\left|\Delta\left(Q_{1,2}\right)_{i}\right| > 2\left(Q_{1,2}\right)_{i+1/2}$  полагать  $\Delta\left(Q_{1,2}\right)_{i} = 2\left(Q_{1,2}\right)_{i+1/2}\operatorname{sign}\left(\Delta\left(Q_{1,2}\right)_{i+1}\right);$
- 4) вычислять разность  $\Delta(Q_{1,2})_i$  по формулам TVD-реконструкции, обеспечивающим неотрицательность  $(\bar{Q}_{1,2})_{i+1/2}^{n+1}$ .

Свойства ДС-схем определяются видом коэффициентов искусственной диссипации  $\delta$ ,  $\gamma$ , в зависимости от которых можно получать разные схемы. Приведем несколько примеров:

- δ = 0,5, γ = 0 схема первого порядка аппроксимации, в которой условия положительности (13) всегда выполняются;
- 2)  $\delta = 0, \gamma = 0$  ДС-схема второго порядка аппроксимации по пространству без искусственной диссипации, в которой условия положительности (13) выполняются при  $\lambda = \lambda^d \ge 0.5$ ;
- 3)  $\delta = \frac{1}{12\lambda}, \gamma = \frac{\delta}{q}$  ДС-схема второго порядка аппроксимации по пространству с искусственной

диссипацией, в которой условие положительности  $\frac{1}{12\lambda} + \lambda \ge 0.5$  всегда выполняется, а для выполнения условия положительности правой части необходимо применять монотонизатор;

- 4)  $\delta = \frac{1}{2} \frac{1 + \exp(-\lambda^{-1})}{1 \exp(-\lambda^{-1})} \lambda, \gamma = 0 ДС$ -схема второго порядка аппроксимации по пространству, в которой инварианты  $\psi_{1,2}^d$  и  $\psi_{1,2}$  всегда положительны;
- 5)  $\delta = \frac{1}{2} \frac{1 + \exp(-\lambda^{-1})}{1 \exp(-\lambda^{-1})} \lambda, \gamma = \frac{\delta}{q} ДС$ -схема второго порядка аппроксимации по пространству (схема УРАЛ), в которой условие положительности  $\delta + \lambda \ge 0.5$  всегда выполняется, а для выполнения условия положительности правых частей системы (11) необходимо применять монотонизатор.

Для последних двух схем можно показать, что параметр  $\delta$  — монотонно возрастающая положительная функция, ограниченная сверху значением 0,5.

По формулам обратного перехода  $U = \frac{\sqrt{3}}{2}(\psi_1 + \psi_2), S = \frac{1}{2}(\psi_2 - \psi_1)$  получаем ДС-схему в обозначениях U и S:

$$(U_{i+1/2})^{n+1} = (U_{i+1/2}^d)^{n+1} + \sqrt{3}\delta\Delta (S_i^d)^{n+1} - \sqrt{3}\gamma q\Delta (F_1)_i^{n+1}; (S_{i+1/2})^{n+1} = (S_{i+1/2}^d)^{n+1} + \frac{\delta}{\sqrt{3}}\Delta (U_i^d)^{n+1} - \frac{\gamma q}{\sqrt{3}}\Delta (F_0)_i^{n+1},$$
(16)

где

$$\begin{pmatrix} U_{i+1/2}^{d} \end{pmatrix}^{n+1} = \frac{\left(U_{i}^{d}\right)^{n+1} + \left(U_{i+1}^{d}\right)^{n+1}}{2}; \quad \left(S_{i+1/2}^{d}\right)^{n+1} = \frac{\left(S_{i}^{d}\right)^{n+1} + \left(S_{i+1}^{d}\right)^{n+1}}{2}; \\ a = \sqrt{3}\delta + \frac{1}{qh}; \quad m = \frac{\delta}{\sqrt{3}} + \frac{1}{3qh} = \frac{a}{3}; \quad F_{0}^{n+1} = \frac{1}{q^{n+1}} \left(\frac{1}{c\tau}U^{n} + \alpha_{c}B^{n+1}\right); \quad F_{1}^{n+1} = \frac{1}{c\tau q^{n+1}}S^{n}; \\ (f_{0})_{i+1/2}^{n+1} = 2\left[\left(F_{0}\right)_{i+1/2}^{n+1} + \sqrt{3}\gamma q\Delta\left(F_{1}\right)_{i}^{n+1}\right]; \quad (f_{1})_{i+1/2}^{n+1} = 2\left[\left(F_{1}\right)_{i+1/2}^{n+1} + \frac{\gamma q}{\sqrt{3}}\Delta\left(F_{0}\right)_{i}^{n+1}\right].$$

Система (15) решается потоковой прогонкой. Затем из системы (16) вычисляются значения величин в центрах ячеек  $U_{i+1/2}^{n+1}$ ,  $S_{i+1/2}^{n+1}$  и счет переходит на следующий временной шаг.

ДС-схемы, обеспечивающие положительность инвариантов, не гарантируют положительности плотности излучения. Поэтому дополнительно приходится строить алгоритмы, обеспечивающие положительность плотности излучения. Простейшими алгоритмами являются монотонизаторы, описанные выше.

Приведем расчеты модельной задачи в вакууме, имеющей точное решение 
$$U = \begin{cases} U_0 & \text{при } x \le \sqrt{3}ct, \\ 0 & \text{при } x > \sqrt{3}ct. \end{cases}$$

В вакууме получаем разрывное решение с постоянной амплитудой в виде полочки, которое удается аппроксимировать монотонно, только размазывая разрыв. По ширине зоны размазывания можно судить о точности аппроксимации. Неявные схемы устойчивы при любом числе Куранта, но положительность и монотонность могут нарушаться при разных числах Куранта. Из условий положительности инвариантов (13)  $\lambda^d = \lambda = \frac{1}{\sqrt{3}qh} \ge 0,5$  получаем условие на число Куранта  $C = \sqrt{2}$ 

 $=\frac{c\tau}{h}\geq \frac{\sqrt{3}}{2}\approx 0,866$ . В численных расчетах рассмотрены варианты как с выполнением условий положительности при C>0,866, так и с их нарушением при C<0,866.

На рис. 1 приведены профили плотности, полученные при  $U_0 = 4\,110$  по трем схемам с C = 0,3 (с нарушением условий положительности). Видно, что наилучший результат дает схема УРАЛ, по которой получается монотонный профиль, более крутой, чем по схеме РОМБ, а точность сравнима с DD-схемой второго порядка аппроксимации. Немонотонный профиль дает только DD-схема.

На рис. 2 приведены профили плотности, полученные с числом Куранта C = 1 (с выполнением условий положительности).

Профили плотности при выполнении условий положительности инвариантов монотонны для всех схем, но наилучшие результаты получаются по схемам DD и УРАЛ. При дальнейшем увеличении числа Куранта (соответственно при уменьшении h) решения по всем схемам сближаются и стремятся к точному.



Рис. 1. Профили U при C = 0,3: — — точное решение; — — — схема УРАЛ; — — — — DD-схема; — — — схема РОМБ



Рис. 2. Профили U при C = 1: — – точное решение; — – схема УРАЛ; — – – DD-схема; — – – схема РОМБ

#### Построение диссипативной схемы с учетом рассеяния

Неявная разностная аппроксимация системы (1) с учетом рассеяния в рамках одной ячейки имеет вид

$$\frac{U_{i+1/2}^{n+1} - U_{i+1/2}^{n}}{c\tau} + \frac{S_{i+1}^{n+1} - S_{i}^{n+1}}{h} + (\alpha_{c}U)_{i+1/2}^{n+1} = (\alpha_{c}B)_{i+1/2}^{n+1};$$

$$\frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^{n}}{c\tau} + \frac{U_{i+1}^{n+1} - U_{i}^{n+1}}{3h} + (\alpha_{c}S + \alpha_{s}S)_{i+1/2}^{n+1} = 0.$$
(17)

Запишем разностную схему (17) в более компактном виде:

$$U_{i+1/2}^{n+1} + \frac{1}{q_1 h} \Delta S_i^{n+1} = (F_0)_{i+1/2}^{n+1}; \quad S_{i+1/2}^{n+1} + \frac{1}{3qh} \Delta U_i^{n+1} = (F_1)_{i+1/2}^n,$$

где  $(F_0)_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{q_1} \left[ \frac{1}{c\tau} U_{i+1/2}^n + (\alpha_c B)_{i+1/2}^{n+1} \right]; (F_1)_{i+1/2}^n = \frac{1}{c\tau q} S_{i+1/2}^n; q_1 = \frac{1}{c\tau} + \alpha_c; q = \frac{1}{c\tau} + \alpha_c + \alpha_s.$ 

Переход к инвариантам Римана  $\psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{3}}U \mp S$  в системе (17) и получение характеристической системы раздельных уравнений относительно инвариантов возможно только при  $\alpha_s = 0$ . В общем случае при  $\alpha_s \neq 0$  для получения характеристической системы в инвариантах можно перейти к псевдоинвариантам  $\psi_{1,2} = \lambda U \mp S$ ,  $\lambda = \sqrt{\frac{q_1}{3q}}$ . Недостатком этого подхода является то, что переход к псевдоинвариантам возможен в предположении слабой зависимости от пространственных координат отношения  $q_1/q$ , зависящего от коэффициентов поглощения и рассеяния, т. е.  $\frac{\partial \lambda}{\partial x} \approx 0$ . Это условие выполняется, например, в предельных случаях оптически прозрачных и плотных сред. В оптически прозрачных средах при  $\alpha_c \to 0$ ,  $\alpha_s \to 0$  получаем  $\lambda = \sqrt{\frac{1+c\tau(\alpha_c+\alpha_s)}{3(1+c\tau\alpha_c)}} \to \frac{1}{\sqrt{3}}$  и  $\frac{\partial \lambda}{\partial x} \to 0$ . В  $\sqrt{\frac{1+c\tau(\alpha_s)}{3(1+c\tau\alpha_s)}}$ 

оптически плотных средах при  $\alpha_c \to \infty$  получаем  $\lambda = \sqrt{\frac{1 + \frac{1 + c\tau\alpha_s}{c\tau\alpha_c}}{3\left(1 + \frac{1}{c\tau\alpha_c}\right)}} \to \frac{1}{\sqrt{3}}$  и  $\frac{\partial\lambda}{\partial x} \to 0$ . В случае

без рассеяния при  $\alpha_s = 0$  всегда получаем  $\lambda = \frac{1}{\sqrt{3}}$  и  $\frac{\partial \lambda}{\partial x} = 0$ . Перейдем к псевдоинвариантам  $\psi_{1,2} = \lambda U \mp S$ ,  $\lambda = \sqrt{\frac{q_1}{3q}}$  в предположении  $\frac{\partial \lambda}{\partial x} \approx 0$ :

$$\frac{\partial \psi_1^{n+1}}{\partial x} - \sqrt{3qq_1}\psi_1^{n+1} = \frac{3\lambda}{c\tau}S^n - \left(\frac{1}{c\tau}U^n + \alpha_c B^{n+1}\right);$$
$$\frac{\partial \psi_2^{n+1}}{\partial x} + \sqrt{3qq_1}\psi_2^{n+1} = \frac{3\lambda}{c\tau}S^n + \left(\frac{1}{c\tau}U^n + \alpha_c B^{n+1}\right).$$

Запишем эту систему в виде

$$\alpha_1 \psi_1^{n+1} - \frac{\partial \psi_1^{n+1}}{\partial x} = f_1^{n+1}; \quad \alpha_1 \psi_2^{n+1} + \frac{\partial \psi_2^{n+1}}{\partial x} = f_2^{n+1}, \tag{18}$$

где  $\alpha_1 = \sqrt{3qq_1}; f_1^{n+1} = \frac{1}{c\tau} U^n + \alpha_c B^{n+1} - \frac{3\lambda}{c\tau} S^n; f_2^{n+1} = \frac{1}{c\tau} U^n + \alpha_c B^{n+1} + \frac{3\lambda}{c\tau} S^n.$ Правые части системы (18) запишем в виде

$$f_1^{n+1} = \frac{\alpha_1}{c\tau q} \psi_1^n + \frac{\alpha_s}{c\tau q} U^n + \alpha_c B^{n+1}; \quad f_2^{n+1} = \frac{\alpha_1}{c\tau q} \psi_2^n + \frac{\alpha_s}{c\tau q} U^n + \alpha_c B^{n+1},$$

или только относительно инвариантов:

$$f_1^{n+1} = \frac{\alpha_1}{c\tau q}\psi_1^n + \frac{\alpha_s}{c\tau q}\frac{\psi_1^n + \psi_2^n}{2\lambda} + \alpha_c B^{n+1}; \quad f_2^{n+1} = \frac{\alpha_1}{c\tau q}\psi_2^n + \frac{\alpha_s}{c\tau q}\frac{\psi_1^n + \psi_2^n}{2\lambda} + \alpha_c B^{n+1}.$$

Отсюда видно, что из условий положительности инвариантов на предыдущем шаге  $\psi_{1,2}^n \ge 0$  следует  $f_{1,2}^{n+1} \ge 0$ . Используя это, можно при соответствующей разностной аппроксимации  $\frac{\partial \psi}{\partial x}$  получить положительное решение  $\psi_{1,2}^{n+1} \ge 0$ . Получить монотонное решение намного сложнее.

положительное решение  $\psi_{1,2}^{n+1} \ge 0$ . Получить монотонное решение намного сложнее. Покажем, что если для аппроксимации системы (18) использовать St-схему, которая для одного уравнения переноса в плоской геометрии  $\frac{1}{c}\frac{\partial N}{\partial t} + \mu \frac{\partial N}{\partial x} + \alpha N = \frac{1}{2}\alpha_c B + \frac{1}{2}\alpha_s U$  всегда дает монотонное положительное решение, то при рассмотрении системы  $P_1$ -уравнений можно получить немонотонное решение.

Разностная аппроксимация системы (18) St-схемой для инвариантов  $(\psi_1)_i = (\psi_1)_{i+1/2}, (\psi_2)_{i+1} = (\psi_2)_{i+1/2}$  имеет вид

$$\alpha_1\psi_{1,i}^{n+1} - \frac{\psi_{1,i+1}^{n+1} - \psi_{1,i}^{n+1}}{h} = f_{1,i+1/2}^{n+1}; \quad \alpha_1\psi_{2,i+1}^{n+1} + \frac{\psi_{2,i+1}^{n+1} - \psi_{2,i}^{n+1}}{h} = f_{2,i+1/2}^{n+1}$$

Запишем эту систему в виде

$$\left(\alpha_1 + \frac{1}{h}\right)\psi_{1,i}^{n+1} = \frac{\psi_{1,i+1}^{n+1}}{h} + f_{1,i+1/2}^{n+1}; \quad \left(\alpha_1 + \frac{1}{h}\right)\psi_{2,i+1}^{n+1} = \frac{\psi_{2,i}^{n+1}}{h} + f_{2,i+1/2}^{n+1}.$$

Составим разности этих уравнений в двух соседних точках:

$$\left(\alpha_1 + \frac{1}{h}\right) \left(\psi_{1,i+1}^{n+1} - \psi_{1,i}^{n+1}\right) = \frac{1}{h} \left(\psi_{1,i+2}^{n+1} - \psi_{1,i+1}^{n+1}\right) + \Delta f_{1,i+1/2}^{n+1};$$

$$\left(\alpha_1 + \frac{1}{h}\right) \left(\psi_{2,i+1}^{n+1} - \psi_{2,i}^{n+1}\right) = \frac{1}{h} \left(\psi_{2,i}^{n+1} - \psi_{2,i-1}^{n+1}\right) + \Delta f_{2,i-1/2}^{n+1};$$

где

$$\begin{split} \Delta f_{1,i+1/2}^{n+1} &= f_{1,i+3/2}^{n+1} - f_{1,i+1/2}^{n+1} = \\ &= \frac{1}{c\tau q} \left( \alpha_1 + \frac{\alpha_s}{2\lambda} \right) \left( \psi_{1,i+1}^n - \psi_{1,i}^n \right) + \frac{\alpha_s}{2\lambda c\tau q} \left( \psi_{2,i+2}^n - \psi_{2,i+1}^n \right) + \alpha_c \left( B_{i+3/2}^{n+1} - B_{i+1/2}^{n+1} \right); \\ \Delta f_{2,i-1/2}^{n+1} &= f_{2,i+1/2}^{n+1} - f_{2,i-1/2}^{n+1} = \\ &= \frac{1}{c\tau q} \left( \alpha_1 + \frac{\alpha_s}{2\lambda} \right) \left( \psi_{2,i+1}^n - \psi_{2,i}^n \right) + \frac{\alpha_s}{2\lambda c\tau q} \left( \psi_{1,i}^n - \psi_{1,i-1}^n \right) + \alpha_c \left( B_{i+3/2}^{n+1} - B_{i+1/2}^{n+1} \right). \end{split}$$

Рекуррентность счета позволяет показать, что монотонный профиль  $\psi_i^n$  на предыдущем шаге n, например, при  $\psi_{i+1}^n - \psi_i^n \ge 0$ , переходит в монотонный профиль на данном шаге,  $\psi_{i+1}^{n+1} - \psi_i^{n+1} \ge 0$ , при выполнении условий на границах для обоих инвариантов  $\psi_{1,I}^{n+1} - \psi_{1,I-1}^{n+1} \ge 0$ ,  $\psi_{2,i=1}^{n+1} - \psi_{2,i=0}^{n+1} \ge 0$  и условий  $B_{i+1/2}^{n+1} - B_{i-1/2}^{n+1} \ge 0$  во всех точках разностной сетки. При этом оба инварианта должны быть одновременно монотонно возрастающими или монотонно убывающими, если не рассматривать тривиальный случай постоянных инвариантов. Сумма и разность двух монотонно возрастающих или монотонно убывающих функций будет также монотонно возрастающей или монотонно убывающих  $U = \frac{\psi_1 + \psi_2}{2\lambda}$ ,  $\varphi_1 = \psi_1$ 

 $S = \frac{\psi_2 - \psi_1}{2}$  получаем выполнение свойства монотонности для плотности и потока излучения.

При разных знаках разностей на границах  $\psi_{1,I}^{n+1} - \psi_{1,I-1}^{n+1}$ ,  $\psi_{2,i=1}^{n+1} - \psi_{2,i=0}^{n+1}$  гарантировать знакопостоянство инвариантов невозможно. В этом случае можно получить немонотонности в плотности и

потоке излучения даже в St-схеме первого порядка аппроксимации. Например, при  $\alpha_c = 0$ ,  $\alpha_s = 0$  (в вакууме) и разных знаках разностей  $\psi_{1,I}^{n+1} - \psi_{1,I-1}^{n+1}$ ,  $\psi_{2,i=1}^{n+1} - \psi_{2,i=0}^{n+1}$  у границ оба инварианта могут быть знакопостоянными, но один — монотонно возрастающим, а второй — монотонно убывающим. Это приводит к немонотонности плотности и потока излучения.

Отсюда вытекают три утверждения для St-схемы в P<sub>1</sub>-приближении:

**Утверждение 1.** В  $P_1$ -приближении монотонность плотности и потока излучения получается при одинаковых знаках разностей  $\psi_{1,I}^{n+1} - \psi_{1,I-1}^{n+1}$ ,  $\psi_{2,i=1}^{n+1} - \psi_{2,i=0}^{n+1}$  у границ.

**Утверждение 2.** В вакууме при разных знаках разностей  $\psi_{1,I}^{n+1} - \psi_{1,I-1}^{n+1}$ ,  $\psi_{2,i=1}^{n+1} - \psi_{2,i=0}^{n+1}$  у границ один инвариант монотонно возрастает, а второй монотонно убывает, что может приводить к немонотонности плотности и потока излучения.

**Утверждение 3.** В реальной среде при  $\alpha_c \neq 0$ ,  $\alpha_s \neq 0$  и разных знаках разностей  $\psi_{1,I}^{n+1} - \psi_{1,I-1}^{n+1}$ ,  $\psi_{2,i=1}^{n+1} - \psi_{2,i=0}^{n+1}$  у границ в зависимости от знака выражения  $B_{i+1/2}^{n+1} - B_{i-1/2}^{n+1}$  можно получить немонотонность в одном из инвариантов, что приведет к немонотонности плотности и потока излучения.

Из этих утверждений следует, что получение монотонного решения в  $P_1$ -системе даже в одномерном плоском случае — непростая задача, которая требует на каждом шаге проверять условия по инвариантам у границ. Инварианты у границ приходится вычислять специально на каждой итерации, так как в окончательной разностной системе они не присутствуют.

В средах с рассеянием схема УРАЛ имеет вид

$$\begin{pmatrix} U_i^d \end{pmatrix}^{n+1} + \begin{pmatrix} U_{i+1}^d \end{pmatrix}^{n+1} + 2a_{i+1/2}^{n+1}\Delta\left(S_i^d\right)^{n+1} = (f_0)_{i+1/2}^{n+1}; \\ \begin{pmatrix} S_i^d \end{pmatrix}^{n+1} + \begin{pmatrix} S_{i+1}^d \end{pmatrix}^{n+1} + 2m_{i+1/2}^{n+1}\Delta\left(U_i^d\right)^{n+1} = (f_1)_{i+1/2}^{n+1}; \\ \begin{pmatrix} U_{i+1/2} \end{pmatrix}^{n+1} = \begin{pmatrix} U_{i+1/2}^d \end{pmatrix}^{n+1} + \frac{\delta}{\lambda} \left[\Delta\left(S_i^d\right)^{n+1} - \eta\Delta\left(F_1\right)_i^n\right]; \\ \begin{pmatrix} S_{i+1/2} \end{pmatrix}^{n+1} = \begin{pmatrix} S_{i+1/2}^d \end{pmatrix}^{n+1} + \delta\lambda \left[\Delta\left(U_i^d\right)^{n+1} - \eta\Delta\left(F_0\right)_i^{n+1}\right]$$

где

$$\begin{pmatrix} U_{i+1/2}^{d} \end{pmatrix}^{n+1} = \frac{\left(U_{i}^{d}\right)^{n+1} + \left(U_{i+1}^{d}\right)^{n+1}}{2}; \quad \left(S_{i+1/2}^{d}\right)^{n+1} = \frac{\left(S_{i}^{d}\right)^{n+1} + \left(S_{i+1}^{d}\right)^{n+1}}{2}; \quad \delta = \frac{1}{2} \frac{1 + \exp\left(-\lambda_{1}^{-1}\right)}{1 - \exp\left(-\lambda_{1}^{-1}\right)} - \lambda_{1}; \\ a = \frac{\delta}{\lambda} + \frac{1}{q_{1}h}; \quad m = \delta\lambda + \frac{1}{3qh}; \quad F_{0}^{n+1} = \frac{1}{q_{1}} \left(\frac{1}{c\tau}U^{n} + \alpha_{c}B^{n+1}\right); \quad F_{1}^{n} = \frac{1}{c\tau q}S^{n}; \quad \lambda_{1} = \frac{1}{h\sqrt{3qq_{1}}}; \\ \lambda = \sqrt{\frac{q_{1}}{3q}}; \quad \left(f_{0}\right)_{i+1/2}^{n+1} = 2\left[\left(F_{0}\right)_{i+1/2}^{n+1} + \frac{\delta}{\lambda}\eta\Delta\left(F_{1}\right)_{i}^{n}\right]; \quad \left(f_{1}\right)_{i+1/2}^{n+1} = 2\left[\left(F_{1}\right)_{i+1/2}^{n+1} + \delta\lambda\eta\Delta\left(F_{0}\right)_{i}^{n+1}\right].$$

Для положительности решения в схему УРАЛ введен параметр монотонизации  $\eta$ :

$$\eta_{i+1/2} = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad (f_0)_{i+1/2} > 0 & \text{м} \quad \left| (F_1)_{i+1/2}^{n+1} \right| > \delta \lambda \left| \Delta \left( F_0 \right)_i^{n+1} \right|; \\ 0 & \text{при} \quad (f_0)_{i+1/2} < 0 & \text{или} \quad \left| (F_1)_{i+1/2}^{n+1} \right| \le \delta \lambda \left| \Delta \left( F_0 \right)_i^{n+1} \right|. \end{cases}$$

В качестве примера приведем расчеты тестовой задачи, моделирующей перенос в неоднородной среде с рассеянием, поглощением и функцией Планка. Среда состоит из трех веществ. В первом веществе при  $0 \le x < 1$  коэффициенты имеют вид  $\alpha_c = 1$ ;  $\alpha_s = 0,1$ ;  $B = 1\,000$ . Во втором веществе при  $1 \le x < 2$  их значения  $\alpha_c = 50$ ;  $\alpha_s = 1$ ;  $B = 10\,000$ . В третьем веществе при  $2 \le x \le 3$  полагается  $\alpha_c = 5$ ;  $\alpha_s = 0,1$ ; B = 100. Граничные условия: слева  $U = 4\,110$ , справа S = 0,5U.

Эта задача не имеет точного решения, поэтому решение сравнивается с расчетом, полученным на очень подробной сетке из 5000 ячеек, на которой все схемы дают одинаковый результат. Рассмотрены два варианта расчетов с числом Куранта C = 0,3 и C = 1.

На рис. 3 приведены профили плотности, полученные по трем схемам с C = 0,3. Видно, что наилучший результат дает схема УРАЛ, по которой получается профиль решения более точный, чем по схеме РОМБ, и более монотонный, чем по DD-схеме.

На рис. 4 приведены профили плотности, полученные по трем схемам с числом Куранта C = 1. Профили решения, полученные по схемам DD и УРАЛ, практически лежат на "точном" решении,





Рис. 4. Профили U при C = 1: — расчет на сетке из 5000 ячеек (точное решение); — — схема УРАЛ; — — DD-схема; — — схема РОМБ

поэтому все три линии совпадают, за исключением границ между областями, где DD-схема дает немонотонное решение. Схема РОМБ дает монотонное решение, но заметно хуже, особенно в первой области.

Приведенные расчеты модельных задач показали, что введение в соотношения связи как плотности и потока излучения с предыдущего шага (задача 1, см. рис. 1, 2), так и функции Планка (задача 2, см. рис. 3, 4) улучшает точность получаемого решения без нарушения свойства монотонности.

#### Заключение

В данной работе предложена новая схема второго порядка аппроксимации по пространству (схема УРАЛ) с улучшенными монотонными свойствами. Для ее построения используется введение диссипативных соотношений связи с учетом функции Планка, плотности и потока излучения как с данного, так и предыдущего шага. Для раздельного изучения влияния учета функции Планка в соотношениях связи, а также плотности и потока с предыдущего шага приведены две модельные задачи, на которых показана необходимость учета этих функций, а также преимущества по сравнению с известными схемами РОМБ и DD.

#### Список литературы

1. 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.

2. Гаджиев А. Д., Писарев В. Н., Рыкованова В. В., Шестаков А. А. Методика и программа ТОМ1 для решения двумерного уравнения теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1985. Вып. 1. С. 53—65.

Gadzhiev A.D., Pisarev V. N., Rykovanova V. V., Shestakov A.A. Metodika i programma TOM1 dlya resheniya dvumernogo uravneniya teploprovodnosti // Voprosy atomnoy nauku i tekhniki. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1985. Vyp. 1. S. 53-65.

3. Гаджиев А. Д., Новаковская С. А., Шестаков А. А. Неявный конечно-объемный метод РОМБ для численного решения двумерного уравнения теплопроводности на нерегулярных сетках из треугольных и четырехугольных ячеек // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 3—13. Садеріан А. D. Neuelsonshave, S. A. Sheatsheer A. A. Neuenny koneshne sh'empty metod POMP

Gadzhiev A. D., Novakovskaya S. A., Shestakov A. A. Neyavny konechno-ob'emny metod ROMB dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya teploprovodnosti na neregulyarnykh setkakh iz treugolnykh i chetyrekhugolnykh yacheek // Tam zhe. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2007. Vyp. 1. S. 3–13.

- Гаджиев А. Д., Шестаков А. А. Метод "Ромб" для решения многогруппового уравнения переноса излучения в P<sub>1</sub>-приближении // Там же. 1989. Вып. 3. С. 66—70. Gadzhiev A. D., Shestakov A. A. Metod "Romb" dlya resheniya mnogogruppovogo uravneniya perenosa izlucheniya v P<sub>1</sub>-priblizhenii // Tam zhe. 1989. Vyp. 3. S. 66—70.
- 5. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А. Двумерная методика "Ромб" для численного решения уравнений переноса излучения в многогрупповом P<sub>1</sub>-приближении // Там же. 1990. Вып. 1. С. 41—47. Gadzhiev A. D., Shestakov A. A. Dvumernaya metodika "Romb" dlya chislennogo resheniya uravneniy perenosa izlucheniya v mnogogruppovom P<sub>1</sub>-priblizhenii // Tam zhe. 1990. Vyp. 1. S. 41—47.
- 6. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А. Методика численного решения двумерного уравнения переноса излучения в многогрупповом *P*<sub>1</sub>-приближении // Тез. докл. 3-й мат. конф. пяти ядерных

центров США и России. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 1996. С. 65.

Gadzhiev A. D., Shestakov A. A. Metodika chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa izlucheniya v mnogogruppovom  $P_1$ -priblizhenii // Tez. dokl. 3-y mat. konf. pyati yadernykh tsentrov SShA i Rossii. Snezhinsk: RFYaTs-VNIITF, 1996. S. 65.

7. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А. Об устойчивости и сходимости конечно-разностной схемы "Ромб" для совместного решения уравнения энергии и уравнения переноса излучения в P<sub>1</sub>приближении // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 1. С. 31—37. Gadzhiev A. D., Shestakov A. A. Ob ustoychivosti i skhodimosti konechno-raznostnoy skhemy "Romb" dlya sovmestnogo resheniya uravneniya energii i uravneniya perenosa izlucheniya v P<sub>1</sub>priblizhenii // Voprosy atomnoy nauku i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh

protsessov. 1993. Vyp. 1. S. 31-37.

- 8. Шестаков А. А. Безусловно устойчивые разностные схемы для решения задачи переноса лучистой энергии в диффузионном и P<sub>1</sub>-приближениях // Там же. Вып. 3. С. 47—53. Shestakov A. A. Bezuslovno ustoychivye raznostnye skhemy dlya resheniya zadachi perenosa luchistoy energii v diffuzionnom i P<sub>1</sub>-priblizheniyakh // Tam zhe. Vyp. 3. S. 47—53.
- Шестаков А. А. О диффузионных свойствах схемы для P<sub>1</sub>-уравнений // Тр. Межд. семинара по супервычислениям. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2010. С. 389—394. Shestakov A. A. O diffuzionnykh svoystvakh skhemy dlya P<sub>1</sub>-uravneniy // Tr. Mezhd. seminara po supervychisleniyam. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2010. S. 389—394.
- Шестаков А. А. О диффузионных свойствах схемы РОМБ для P<sub>1</sub>-уравнений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 2. С. 56—62.
   Shestakov A. A. O diffuzionnykh svoystvakh skhemy ROMB dlya P<sub>1</sub>-uravneniy // Voprosy atomnoy nauku i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2011. Vyp. 2. S. 56— 62.
- 11. Гаджиев А. Д., Селезнёв В. Н., Романова Е. М., Шестаков А. А. Методика ТОМ4-КД для математического моделирования двумерных уравнений переноса излучения в многогрупповом квазидиффузионном приближении // Там же. 2001. Вып. 4. С. 48—59. Gadzhiev A. D., Seleznev V. N., Romanova E. M., Shestakov A. A. Metodika TOM4-KD dlya matematicheskogo modelirovaniya dvumernykh uravneniy perenosa izlucheniya v mnogogruppovom kvazidiffuzionnom priblizhenii // Tam zhe. 2001. Vyp. 4. S. 48—59.
- 12. Грабовенская С. А., Шестаков А. А. Анализ некоторых схем для решения уравнения переноса излучения квазидиффузионным методом // Тр. Межд. семинара по супервычислениям. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2010. С. 118—127. *Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A.* Analiz nekotorykh skhem dlya resheniya uravneniya perenosa izlucheniya kvazidiffuzionnym metodom // Tr. Mezhd. seminara po supervychisleniyam. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2010. S. 118—127.
- 13. Грабовенская С. А., Шестаков А. А. Анализ некоторых схем для решения уравнения переноса излучения квазидиффузионным методом // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 4. С. 3—15. Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A. Analiz nekotorykh skhem dlya resheniya uravneniya perenosa izlucheniya kvazidiffuzionnym metodom // Voprosy atomnoy nauku i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2011. Vyp. 4. S. 3—15.
- 14. Грабовенская С. А., Завъялов В. В., Шестаков А. А. Конечно-объемная схема ГРОМ для решения переноса излучения квазидиффузионным методом // Там же. 2014. Вып. 3. С. 47—58.

*Grabovenskaya S. A., Zavyalov V. V., Shestakov A. A.* Konechno-obemnaya skhema GROM dlya resheniya perenosa izlucheniya kvasidiffusionnym metodom // Tam zhe. 2014. Vyp. 3. S. 47–58.

- 15. Шестаков А. А. Принцип максимума, минимума для системы переноса лучистой энергии в P<sub>1</sub>-приближении // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 2. С. 73—74. Shestakov A. A. Printsip maksimuma, minimuma dlya sistemy perenosa luchistoy energii v P<sub>1</sub>priblizhenii // Voprosy atomnoy nauku i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovaniye fizicheskikh protsessov. 1993. Vyp. 2. S. 73—74.
- 16. Гаджиев А. Д., Вершинская А. С., Грабовенская С. А., Шестаков А. А. Применение TVDреконструкции для построения монотонной и второго порядка схемы РОМБ решения уравнения переноса теплового излучения в P<sub>1</sub>-приближении // Тез. докл. Межд. семинара по супервычислениям. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2008. С. 45. Gadzhiev A. D., Vershinskaya A. S., Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A. Primenenie TVDrekonstruktsii dlya postroeniya monotonnoy i vtorogo poryadka skhemy ROMB resheniya uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v P<sub>1</sub>-priblizhenii // Tez. dokl. Mezhd. seminara po supervychisleniyam. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2008. S. 45.
- 17. Гаджиев А. Д., Вершинская А. С., Грабовенская С. А., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к решению уравнения переноса теплового излучения в P<sub>1</sub>-приближении // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 21—36. Gadzhiev A. D., Vershinskaya A. S., Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A. Primenenie TVD-

Gaazheev A. D., Vershinskaya A. S., Graoovenskaya S. A., Shestakov A. A. Frinenenie TVDpodkhoda k resheniyu uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v  $P_1$ -priblizhenii // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2009. Vyp. 2. S. 21–36.

 Вершинская А. С., Шестаков А. А. Исследование порядка численной сходимости TVD-схемы для решения уравнения переноса теплового излучения в P<sub>1</sub>-приближении // Там же. 2013. Вып. 1. С. 18—33.

Vershinskaya A. S., Shestakov A. A. Issledovanie poryadka chislennoy skłodimosti TVD-skhemy dlya resheniya uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v  $P_1$ -priblizhenii // Tam zhe. 2013. Vyp. 1. S. 18—33.

- Гаджиев А. Д., Кошутин Д. А., Шестаков А. А. TVD-схема для численного решения переноса излучения в P<sub>1</sub>-приближении // Там же. 2013. Вып. 2. С. 48—55. Gadzhiev A. D., Koshutin D. A., Shestakov A. A. TVD-skhema dlya chislennogo resheniya perenosa izlucheniya v P<sub>1</sub>-priblizhenii // Tam zhe. 2013. Vyp. 2. S. 48—55.
- 20. Гаджиев А. Д., Чубарешко И. С., Шестаков А. А. Неявная конечно-объемная схема с TVDреконструкцией для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в P<sub>1</sub>-приближении // Тез. докл. XII Межд. конф. "Забабахинские науч. чтения". Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2014. С. 334. Gadzhiev A. D., Chubareshko I. S., Shestakov A. A. Neyavnaya konechno-obemnaya skhema s TVDrekonstruktsiey dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v Pr-priblizbenii // Tez. dokl. XII Mezhd. konf. "Zababakhinskie nauch. chteniya". Snezhinsk:

v  $P_1$ -priblizhenii // Tez. dokl. XII Mezhd. konf. "Zababakhinskie nauch. chteniya". Snezhinsk: RFYaTs-VNIITF, 2014. S. 334.

 Гаджиев А. Д., Чубарешко И. С., Шестаков А. А. Неявные конечно-объемные TVD-методы для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в P<sub>1</sub>-приближении // Тез. докл. XIII Межд. конф. "Забабахинские науч. чтения". Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2017. С. 355.
 Cadrbiner A. D. Chyberrachko I. S. Shestakov A. A. Navaynya koncelus chempyo TVD metody.

Gadzhiyev A. D., Chubareshko I. S., Shestakov A. A. Neyavnye konechno-obemnye TVD-metody dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v $P_1$ -priblizhenii // Tez. dokl. XIII Mezhd. konf. "Zababakhinskie nauch. chteniya". Snezhinsk: RFYaTs-VNIITF, 2017. S. 355.

22. Гаджиев А. Д., Чубарешко И. С., Шестаков А. А. Неявный конечно-объемный TVD-метод для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в *P*<sub>1</sub>-приближении //

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2017. Вып. 2. С. 18—29.

Gadzhiev A. D., Chubareshko I. S., Shestakov A. A. Neyavny konechno-obemny TVD-metod dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v  $P_1$ -priblizhenii // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2017. Vyp. 2. S. 18–29.

- 23. Гаджиев А. Д., Завъялов В. В., Грабовенская С. А., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к решению уравнения переноса теплового излучения квазидиффузионным методом // Тез. докл. Межд. семинара по супервычислениям. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. С. 33. Gadzhiev A. D., Zavyalov V. V., Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A. Primenenie TVD-podkhoda k resheniyu uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya kvazidiffuzionnym metodom // Tez. dokl. Mezhd. seminara po supervychisleniyam. Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2009. S. 33.
- 24. Гаджиев А. Д., Завъялов В. В., Грабовенская С. А., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к решению уравнения переноса теплового излучения квазидиффузионным методом // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 3. С. 3—14.

Gadzhiev A. D., Zavyalov V. V., Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A. Primenenie TVD-podkhoda k resheniyu uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya kvazidiffuzionnym metodom // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2010. Vyp. 3. S. 3–14.

- 25. Шестаков А. А. О монотонной аппроксимации системы  $P_1$ -уравнений // Тез. докл. XIII Межд. конф. "Забабахинские 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. S. 358.
- 26. Шестаков А. А. К вопросу построения монотонной разностной аппроксимации системы P<sub>1</sub>уравнений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2017. Вып. 1. С. 30—45. Shestakov A. A. K voprosu postroeniya monotonnoy raznostnoy approksimatsii sistemy P<sub>1</sub>-uravneniy // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2017. Vyp. 1. S. 30—45.
- 27. 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 dissipatsiey i VDM-metod uskoreniya iteratsiy dlya chislennogo resheniya dvumernogo uravneniya perenosa teplovogo izlucheniya v kineticheskoy modeli // Tam zhe. 2003. Vyp. 4. S. 33—46.

Статья поступила в редакцию 07.05.18.

DIFFERENCE SCHEME "URAL" FOR SOLVING A HYPERBOLIC SYSTEM OF  $P_1$ -EQUATIONS УРАВНЕНИЙ / I. S. Chubareshko, A. A. Shestakov (FSUE "Acad. E. I. Zababakhin RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region).

Issues of constructing monotone difference schemes to solve the heat transport equation in the  $P_1$ -approximation are discussed in many papers. This paper offers a new difference scheme that improves the solution monotonicity while approximating the hyperbolic equation. For this purpose, the technique of constructing dissipative schemes for a system of  $P_1$ -equations written in Riemann invariants is used. The specific feature of the new scheme is in accounting the Planck function in expressions describing the relationship between the integral mean values of quantities and the values of quantities at nodes of difference intervals.

Keywords: a transport equation in the  $P_1$ -approximation, difference scheme.
УДК 519.6

# АЛГОРИТМ ИТЕРАЦИОННОЙ КОРРЕКЦИИ ВРЕМЕН ДЕТОНАЦИИ ЗА СЧЕТ УЧЕТА НАПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В МЕТОДИКЕ "ЛЭГАК"

# Н. А. Володина, С. А. Краюхин (ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Приводится описание нескольких методов повышения точности базового пошагового алгоритма расчета идеальной детонации BB в методике ЛЭГАК. Основное внимание уделено алгоритму итерационной коррекции времен инициирования BB за счет учета направления движения детонационной волны. Для демонстрации применимости алгоритма приведены результаты расчетов нескольких методических задач по распространению детонационной волны в BB.

*Ключевые слова:* взрывчатое вещество, идеальная детонация, время инициирования детонации, скорость распространения детонационной волны, фронт детонационной волны.

#### Введение

В методике ЛЭГАК [1] для моделирования процесса распространения идеальной детонации используются два типа алгоритмов: геометрические и пошаговые.

Для геометрических алгоритмов положение фронта детонации на каждый момент времени определяется исходя из начального положения инициирования. То есть исходной посылкой для построения алгоритмов контроля скорости детонации такого типа является задание той или иной поверхности инициирования BB, от которой происходит дальнейшее распространение детонационной волны (ДВ) с постоянной скоростью.

Так называемые пошаговые алгоритмы расчета идеальной детонации основаны на принципе Гюйгенса, согласно которому каждая точка, до которой дошла ДВ, становится источником распространения вторичной ДВ, а огибающая этих волн дает положение фронта детонации в следующий момент времени. К преимуществам пошаговых алгоритмов по сравнению с геометрическими можно отнести то, что они позволяют проводить расчеты систем с достаточно сложной геометрией и учитывать изменение формы BB за счет газодинамических воздействий. Пошаговые алгоритмы также можно разделить на два класса: точные и приближенные.

Особенностью точных пошаговых алгоритмов является хранение в некотором виде информации о точках, которые являются источниками волн, для точного расчета времен детонации. Реализация точного пошагового алгоритма является отдельной сложной задачей и в данной статье не рассматривается. Детальное описание точного пошагового алгоритма приведено в [2].

В приближенных пошаговых методах для анализа времен детонации в сдетонировавших узлах задается область влияния — окрестность фиксированного размера. Небольшой размер данной окрестности (2—3 сеточных узла) дает недостаточную точность вычислений, а повышение точности за счет увеличения количества рассматриваемых точек приводит к существенному снижению производительности. Выходом из данной ситуации является алгоритм коррекции времен детонации за счет учета направления движения ДВ, который позволяет существенно повысить точность пошагового алгоритма без серьезного увеличения вычислительной нагрузки. Описанию алгоритма коррекции времен детонации, реализованного в методике ЛЭГАК, посвящена данная статья.

#### Базовый пошаговый алгоритм расчета идеальной детонации в методике ЛЭГАК

Базовым пошаговым алгоритмом расчета идеальной детонации в методике ЛЭГАК будем называть приближенный пошаговый алгоритм, суть которого заключается в том, что время прихода детонации в узел счетной сетки можно рассчитать по скорости ДВ и временам детонации в узлах некоторой окрестности влияния.

Для реализации этого алгоритма в структуру данных методики ЛЭГАК был введен массив времен прихода ДВ в узлы счетной сетки. В начальный момент времени в каждый элемент массива заносится большое число, заведомо большее полного времени расчета (10<sup>6</sup>).

Для каждого узла, для которого нужно определить время прихода волны, время определяется по формуле  $t_d = \min\left(t_d^j + \frac{dist^j}{D}\right)$ , где  $t_d^j$  — время детонации узла-источника j;  $dist^j$  — расстояние от данного узла до узла j; D — скорость распространения детонации; j — индекс узла в окрестности  $2^*$  от данного узла. Данный размер окрестности влияния обусловлен размером пересечения сеточных фрагментов при многопроцессорном счете в методике ЛЭГАК.

В трехмерном случае расчетная ячейка представляет собой шестигранник с восемью вершинами — узлами счетной сетки. Определение времен прихода ДВ  $t_d$  производится на каждом временном шаге только для узлов тех ячеек ВВ, которые содержат от 1 до 7 уже сдетонировавших узлов. Если сдетонировавших узлов нет или, наоборот, все узлы уже сдетонировали, то времена детонации в узлах данной ячейки не определяются. Использование такого подхода уменьшает количество ячеек, в которых будут определяться времена детонации, что существенно сокращает время выполнения программы.

Далее по вычисленным временам прихода ДВ определяются точки пересечения ребер счетных ячеек с поверхностью фронта ДВ. Затем для каждой такой ячейки определяется ее часть, которая находится за фронтом ДВ, и вычисляется отношение объема многогранника, отсекаемого фронтом ДВ, к объему ячейки, т. е. находятся концентрации продуктов взрыва (ПВ) в данной ячейке. При анализе времен детонации в соседних узлах счетной сетки в базовом алгоритме пошаговой детонации используется окрестность из двух узлов. Это приводит к тому, что детонация на квадратных (кубических) сетках распространяется не по прямой, а по ломаной (за исключением углов 0°,  $45^{\circ}$  и 90° к линиям сетки). На рис. 1 приведен путь распространения детонации по базовому алгоритму пошаговой детонации в сравнении с аналитическим путем.

Для повышения точности определения времен прихода ДВ в методике ЛЭГАК была разработана возможность увеличения размера окрестности влияния. В данном алгоритме для каждого узла, для которого нужно определить время прихода ДВ, это время определяется по той же формуле  $t_d = \min\left(t_d^j + \frac{dist^j}{D}\right)$ , однако индекс узла *j* изменяется в окрестности *r* данного узла (*r* — число, задаваемое пользователем).

Так как стандартно в методике ЛЭГАК пересечение сеточных фрагментов при многопроцессорном счете равно двум ячейкам, то для правильности расчета времен детонации на границах фрагментов счетной сетки при многопроцессорном счете было необходимо увеличить пересечение областных массивов для программы детонации до размера окрестности *r*. Для решения этой задачи также была реализована подпрограмма создания новых фрагментов с необходимым (произвольным) количеством ячеек в пересечении при использовании алгоритма пошаговой детонации с увеличенным размером окрестности влияния.



Рис. 1. Пути распространения детонации: – – – — по базовому алгоритму пошаговой детонации; — — аналитический путь; 1 — точка инициирования; 2, 3 — узлы, в которых рассчитывается время детонации

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup>Здесь и далее *окрестность* N означает окрестность влияния размером в N сеточных узлов.

Очевидно, что чем больше окрестность влияния, тем точнее рассчитываются времена детонации, однако при этом существенно возрастает вычислительная нагрузка, что является главным недостатком пошагового алгоритма с увеличенной окрестностью.

Также для алгоритма пошаговой детонации с увеличенным размером окрестности влияния был реализован алгоритм "Инерт" для обхода инертного вещества при расчете времен прихода детонации по заданной концентрации ВВ или ПВ. Наиболее простой пример подобной ситуации представлен на рис. 2, когда прямая линия между узлами 1 и 2 пересекает инертное вещество.

В двумерном случае между узлом-источником и узлом, в котором рассчитывается время детонации, строится линия и определяется ее пересечение со сторонами ячеек, лежащими в прямоугольной окрестности построенной линии. В трехмерном случае для определения пересечения отрезка с гранями трехмерной ячейки поверхность ячейки разбивается на треугольники.

После определения пересеченных ячеек проверяется наличие в них заданной концентрации ВВ и ПВ. Если в одной из пересеченных ячеек данное условие не выполняется, узел-источник считается невидимым для узла, в котором рассчитывается время детонации.

Время выполнения алгоритма обхода инертного вещества также существенно зависит от размера окрестности, поэтому опытным путем установлено, что для приемлемого календарного времени счета двумерных задач оптимальное значение размера окрестности *r* составляет до 6 узлов, а для трехмерных задач — только до 4 узлов.

Указанные ограничения на размер окрестности влияния привели к поиску решения, позволяющего повысить точность пошагового алгоритма без увеличения вычислительной нагрузки. Подходящим решением оказалась идея учета направления движения фронта ДВ.

## Алгоритм итерационной коррекции времен детонации в методике ЛЭГАК

Алгоритм итерационной коррекции времен детонации в методике ЛЭГАК основан на идее учета направления распространения ДВ [3], которая успешно реализована в подобном алгоритме методики ТИМ [4]. Если в стандартном пошаговом алгоритме находится минимальное время детонации узла от одного из соседних, уже сдетонировавших узлов, то процедура коррекции позволяет найти точку-источник с минимальным временем прихода детонации внутри ячейки, проведя интерполяцию по временам детонации из нескольких узлов.

Алгоритм метода коррекции поясним с помощью рис. 3.

Пусть нужно вычислить время детонации в точке  $P_0$  по временам в точках  $P_1$  и  $P_2$ . Зная времена детонации в точках  $P_1$  и  $P_2$  и считая, что изменение времени от  $P_1$  к  $P_2$  происходит линейно, можно определить времена прихода ДВ во все точки отрезка  $P_1P_2$  линейной интерполяцией. Взяв за параметр расстояние  $|P_1S|$ , где S — произвольная точка на отрезке  $P_1P_2$ , и найдя минимум по этому параметру функции  $t_S + \frac{|P_0S|}{D}$ , где D — скорость детонации,  $t_S$  — время детонации в точке S, скорректируем время прихода ДВ от данной пары ячеек. В трехмерном случае алгоритм выглядит аналогично: вместо пары точке  $P_1$  и  $P_2$  с известными временами детонации используются три точки, образующие треуголь-



Рис. 2. Пример пересечения инертного вещества



Рис. 3. Фрагмент двумерной счетной сетки

ник, внутри которого времена можно определить линейной интерполяцией. Однако в трехмерном случае сильно возрастает сложность минимизации функции  $t_S + \frac{|P_0S|}{D}$  и данная реализация (назовем ее аналитической коррекцией) может привести к существенному снижению производительности.

Поскольку высокая производительность для методики ЛЭГАК является существенным фактором, было решено не минимизировать указанную функцию, а организовать итерационный процесс, используя несколько вспомогательных точек внутри зоны интерполяции.

В двумерном случае на отрезке  $P_1P_2$  необходимо определить координаты трех дополнительных точек (рис. 4): точка  $P_3$  — середина отрезка  $P_1P_2$ , точка  $P_4$  — середина отрезка  $P_1P_3$ , точка  $P_5$  — середина отрезка  $P_3P_2$ .

Так как изменение времен детонации на отрезке происходит линейно, время детонации в любой точке  $P_n$  отрезка  $P_1P_2$  можно выразить следующим образом:

$$t_{P_n} = \alpha t_{P_1} + \beta t_{P_2}.$$

Коэффициенты <br/>  $\alpha,\,\beta$ можно получить, решив систему уравнений

$$X_{P_n} = \alpha X_{P_1} + \beta X_{P_2};$$
  
$$Y_{P_n} = \alpha Y_{P_1} + \beta Y_{P_2}.$$

Однако данные точки выбраны не случайно, для них определить коэффициенты  $\alpha$ ,  $\beta$  можно без решения системы уравнений. Так, для точки  $P_3 \alpha = 1/2$ ,  $\beta = 1/2$ . Для точки  $P_4 \alpha = 3/4$ ,  $\beta = 1/4$ . Для точки  $P_5 \alpha = 1/4$ ,  $\beta = 3/4$ .

После вычисления коэффициентов и времен инициирования детонации в точках  $P_n$  находим время детонации в точке  $P_0$ :

$$t_{P_0} = t_{P_n} + \frac{|P_0 P_n|}{D}.$$

Затем находим минимальное значение  $t_{P_0}$ , которое и является уточненным временем прихода ДВ в точку  $P_0$ . При необходимости две точки,



Рис. 4. Разбиение отрезка в двумерном случае

для которых  $t_{P_0}$  минимально, принимаем за  $P_1$  и  $P_2$  и повторяем итерацию.

Алгоритм итерационной коррекции времен детонации в трехмерном случае выполняется аналогичным образом. Рассмотрим фрагмент трехмерной кубической счетной сетки (рис. 5) с узлом  $P_0$ , у которого как минимум в трех соседних узлах  $P_1$ ,  $P_2$  и  $P_3$  известно время детонации.

Если в базовом пошаговом алгоритме время инициирования для узла  $P_0$  ищется от одного из узлов в некоторой окрестности, то в алгоритме итерационной коррекции минимальное время инициирования данной ячейки ищется при последовательном рассмотрении троек соседних узлов. Необходимо определить время прихода ДВ в точку  $P_0$ .

Последовательно перебирая тройки соседних узлов (всего их 96), находим тройку узлов  $P_1$ ,  $P_2$  и  $P_3$ , в которых известно время детонации. В каждом треугольнике  $P_1P_2P_3$ , образованном тремя соседними узлами с известными временами детонации, необходимо вычислить координаты 16 дополнительных точек (рис. 6): точки  $P_4-P_6$  — середины сторон треугольника;  $P_7$  — точка пересечения медиан треугольника, или центр масс;  $P_8-P_{13}$  — середины отрезков между вершинами и серединами сторон треугольника;  $P_{14}-P_{19}$  — середины отрезков между вершинами и сторон и центром масс треугольника.

Так как изменение времен детонации в треугольнике происходит линейно, время детонации в любой точке  $P_n$  треугольника  $P_1P_2P_3$  можно выразить следующим образом:

$$t_{P_n} = \alpha t_{P_1} + \beta t_{P_2} + \gamma t_{P_3}.$$

Коэффициенты  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  можно получить, решив систему уравнений



Рис. 5. Фрагмент трехмерной кубической счетной сетки



Рис. 6. Схема разбиения треугольника

$$X_{P_n} = \alpha X_{P_1} + \beta X_{P_2} + \gamma X_{P_3};$$
  

$$Y_{P_n} = \alpha Y_{P_1} + \beta Y_{P_2} + \gamma Y_{P_3};$$
  

$$Z_{P_n} = \alpha Z_{P_1} + \beta Z_{P_2} + \gamma Z_{P_3}.$$

Решение такой системы для 16 точек в каждом треугольнике — достаточно затратная операция с точки зрения производительности. Однако данные точки выбраны не случайно, для них определить коэффициенты  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  можно без решения системы уравнений. Так, например, для точки  $P_7 \alpha = 1/3$ ,  $\beta = 1/3$ ,  $\gamma = 1/3$ ; для точки  $P_5 \alpha = 1/2$ ,  $\beta = 0$ ,  $\gamma = 1/2$ ; для  $P_8 \alpha = 0$ ,  $\beta = 1/4$ ,  $\gamma = 3/4$ .

Для точек  $P_{14}-P_{19}$  времена также находим, считая, что изменение времени детонации между центром масс и точками  $P_1-P_6$  происходит линейно. Подбор коэффициентов  $\alpha$ ,  $\beta$  производится аналогично.

После вычисления коэффициентов и времен инициирования детонации в точках  $P_n$  находим время детонации в точке  $P_0$ :

$$t_{P_0} = t_{P_n} + \frac{P_0 P_n}{D}.$$

Затем находим минимальное значение  $t_{P_0}$ , которое и является уточненным временем прихода ДВ в точку  $P_0$ . При необходимости три точки, для которых  $t_{P_0}$  минимально, принимаем за  $P_1-P_3$  и повторяем итерацию.

По сравнению с методом уточнения, основанным на аналитической коррекции, пошаговый алгоритм с итерационной коррекцией достаточно прост в реализации для трехмерного случая и имеет хорошую производительность в сравнении с базовым алгоритмом для увеличенной окрестности влияния.

#### Результаты методических расчетов

В данном разделе приведены результаты расчетов нескольких методических задач. Сравниваются точность разработанных алгоритмов и время их выполнения.

Задача 1. Задача имеет двумерную геометрию. Сферическая ДВ распространяется в квадратной области  $10 \text{ см} \times 10 \text{ см}$  из центральной точки (5 см, 5 см). Область заполнена ВВ с постоянной скоростью распространения ДВ D = 8,83 км/с. Сетка прямоугольная с размером ячеек  $0,01 \text{ см} \times 0,02 \text{ см}$ , всего 0,5 млн сеточных узлов. Прямоугольная сетка выбрана специально для исследования погрешности на вытянутых сетках.

На рис. 7 представлено сравнение формы фронтов сферической ДВ на момент времени t = 5 мкс для базового пошагового алгоритма с различными размерами окрестности влияния.

На рис. 8, 9 приведены погрешности определения времен инициирования детонации относительно точного значения, полученного аналитически, при достижении фронтом верхней и правой границ области.

На рис. 10 представлено сравнение формы фронтов сферической ДВ на момент времени t = 5 мкс для пошагового алгоритма с итерационной коррекцией (3 итерации) и аналитической коррекцией времен детонации.

На рис. 11, 12 приведено сравнение погрешностей определения времен инициирования детонации при достижении фронтом верхней и правой границ области для базового алгоритма с окрестностью 4 и алгоритма с итерационной коррекцией (3 итерации).

На рис. 13, 14 демонстрируется сходимость итерационного процесса.

В табл. 1 приведены максимальные погрешности определения времен инициирования детонации при достижении фронтом верхней и правой границ области для всех методов.

В табл. 2 представлено сравнение времен выполнения всех реализованных алгоритмов для данной задачи.



Рис. 7. Задача 1. Фронт сферической ДВ на момент времени t = 5 мкс для базового пошагового алгоритма с различными размерами окрестности влияния: a — окрестность 1; b — окрестность 2; b — окрестность 3; r — окрестность 4



Рис. 8. Задача 1. Сравнение погрешностей на верхней границе области для базового алгоритма с различными размерами окрестности влияния: — — — — окрестность 1; — — — — окрестность 2; — — — — окрестность 3; — × — — — окрестность 4



Рис. 9. Задача 1. Сравнение погрешностей на правой границе области для базового алгоритма с различными размерами окрестности влияния: — — — — окрестность 1; — — — — — окрестность 2; — — — — — окрестность 3; — × — — — окрестность 4



Рис. 10. Задача 1. Фронт сферической ДВ на момент времени t = 5 мкс для окрестности 1 с аналитической (*a*) и итерационной (*б*) коррекцией времен детонации

Таблица 1

Максимальные	погрешности	определения	времен	детонации	в задаче 1
	1	1 / 1		/ 1 1	/ \

ность, %



Рис. 11. Задача 1. Сравнение погрешностей для базового алгоритма с окрестностью 4 (—×—) и алгоритма с итерационной коррекцией (—) на верхней границе области



Рис. 12. Задача 1. Сравнение погрешностей для базового алгоритма с окрестностью 4 (—×—) и алгоритма с итерационной коррекцией (—) на правой границе области

Таблица 2

Времена выполнения алгоритмов для задачи 1

Алгоритм	Время, с
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 1	47,5
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 2	47,7
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 3	49,3
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 4	51,2
Алгоритм с аналитической коррекцией	$47,\! 6$
Алгоритм с итерационной коррекцией, 1 итерация	48,0
Алгоритм с итерационной коррекцией, 2 итерации	48,1
Алгоритм с итерационной коррекцией, 3 итерации	48,9





Задача 2. Задача имеет трехмерную геометрию. Сферическая ДВ распространяется в кубической области  $10 \text{ см} \times 10 \text{ см} \times 10 \text{ см}$  из центральной точки (5 см, 5 см). Область заполнена ВВ с постоянной скоростью распространения ДВ D = 8,83 км/c. Сетка прямоугольная с размером ячеек  $0,05 \text{ см} \times 0,1 \text{ см} \times 0,1 \text{ см}$ , всего 2 млн узлов.

В табл. 3 приведены максимальные погрешности определения времен инициирования детонации при достижении фронтом границ области для всех методов. Также для данной задачи на рис. 15 приведено поле значений времен инициирования на момент времени t = 5 мкс для алгоритма с итерационной коррекцией (3 итерации), полученное при помощи системы графической и численной обработки данных ScientificView [5]. Визуально фронт ДВ имеет идеальную сферическую форму.

В табл. 4 представлено сравнение времен выполнения всех реализованных алгоритмов для данной задачи.

#### Таблица 3

Таблица 4

#### Максимальные погрешности определения времен детонации в задаче 2

Алгоритм	Максимальная погрешность, %
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 1	17,1
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 2	$4,\!6$
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 3	$^{2,8}$
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 4	1,4
Алгоритм с итерационной коррекцией, 1 итерация	$1,\!6$
Алгоритм с итерационной коррекцией, 2 итерации	$1,\!2$
Алгоритм с итерационной коррекцией, 3 итерации	1,1
Алгоритм с итерационной коррекцией, 10 итераций	1,1

#### Времена выполнения алгоритмов для задачи 2

Алгоритм	Время, с
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 1	13,3
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 2	15,4
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 3	30,7
Базовый пошаговый алгоритм, окрестность 4	73,4
Алгоритм с итерационной коррекцией, 1 итерация	22,3
Алгоритм с итерационной коррекцией, 2 итерации	27,3
Алгоритм с итерационной коррекцией, 3 итерации	$32,\!6$



Рис. 15. Задача 2. Поле значений времен иниции<br/>рования детонации на момент времени  $t=5\,{\rm mkc}$ 

Задача 3. Задача имеет двумерную геометрию. В области радиусом 30 см из крайней точки (30 см, 0) в начальный момент времени распространяется ДВ. В центре области находится инертное вещество радиусом R = 9 см, остальное пространство счетной области заполнено ВВ

с постоянной скоростью распространения детонации D = 7,6 км/c. Задана сферическая расчетная сетка, состоящая из 250 тыс. узлов.

На рис. 16 представлены положения фронта ДВ на моменты времени t = 25 мкс и t = 50 мкс для базового пошагового алгоритма с окрестно-



Рис. 16. Задача 3. Фронт ДВ для базового алгоритма с окрестностью 4 (слева) и алгоритма с итерационной коррекцией (справа): a - t = 25 мкс;  $\delta - t = 50$  мкс

стью 4 и алгоритма с итерационной коррекцией (3 итерации). Как видно из рисунков, для базового пошагового алгоритма на сферических сетках характерна ступенчатость фронта (даже с большим размером окрестности) в отличие от алгоритма с итерационным уточнением. На рис. 17 представлены графики погрешностей определения времен детонации на внутренней границе ВВ для различных алгоритмов. За точное решение взяты времена детонации, полученные с помощью точного геометрического алгоритма. Результаты получены с помощью опре-



Рис. 17. Задача 3. Погрешность времен детонации на внутренней границе BB: — — — итерационная коррекция; — — — аналитическая коррекция; — — базовый алгоритм, окрестность 4

деления времен прихода УВ на набор из 180 точек на половине окружности (номер точки соответствует углу в градусах) радиусом R = 9 см.

Максимальная погрешность определения времен детонации в данном расчете для базового алгоритма с окрестностью 4 составила 5,16 %, для алгоритма с итерационной коррекцией — 0,75 %, для алгоритма с аналитической коррекцией — 0,79 %.

Дальнейшее увеличение числа итераций не дает существенного уменьшения погрешности определения времен детонации на всех тестовых задачах и приводит к снижению производительности.

## Заключение

В данной статье описана реализация алгоритма итерационной коррекции времен детонации за счет учета направления движения детонационной волны в методике ЛЭГАК для двумерного и трехмерного случаев.

Приведенные результаты методических расчетов позволяют сделать вывод о хорошей точности предложенного алгоритма, его высокой эффективности и простоты реализации. Данный алгоритм позволил существенно повысить точность определения времен детонации для вытянутых и сферических сеток. Также достоинствами данного алгоритма являются его универсальность и независимость от геометрии задачи.

Следует отметить, что на момент публикации данной статьи реализованный алгоритм уже прошел полномасштабную верификацию на прикладных задачах и является основным алгоритмом для большинства двумерных и трехмерных задач, решаемых по методике ЛЭГАК.

## Список литературы

 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., Циберев 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., Borlyaev 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 pamyatyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2004. Vyp. 4. S. 41–50.

- Кирюхина М. Н., Наумов А. О. Модификация двумерного алгоритма расчета идеальной детонации в методике ЛЭГАК на основе принципа Гюйгенса // Молодежь в науке: сб. докл. XVI науч.-тех. конф. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2018. Т. 1. С. 92—98. *Kiryukhina M. N., Naumov A. O.* Modifikatsiya dvumernogo algoritma rascheta idealnoy detonatsii v metodike LEGAK na osnove printsipa Gyuygensa // Molodezh v nauke: sb. dokl. XVI nauch.-tekh. konf. Sarov: RFYaTs-VNIIEF. 2018. Т. 1. S. 92—98.
- Соколов С. С., Мотлохов В. Н., Пушкарев А. А. Алгоритмы контроля скорости детонации в методике ТИМ-2D // Молодежь в науке: сб. докл. VI науч.-тех. конф. 2008. С. 165—171. Sokolov S. S., Motlokhov V. N., Pushkarev A. A. Algoritmy kontrolya skorosti detonatsii v metodike TIM-2D // Molodezh v nauke: sb. dokl. VI nauch.-tekh. konf. 2008. S. 165—171.
- 4. Соколов С. С., Панов А. И., Воропинов А. А., Новиков И. Г., Соболев И. В., Ялозо А. В. Методика ТИМ расчета трехмерных задач механики сплошных сред на неструктурированных многогранных лагранжевых сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 3. С. 37—52. Sokolov S. S., Panov A. I., Voropinov A. A.,

Sokolov S. S., Panov A. I., Voropinov A. A., Novikov I. G., Sobolev I. V., Yalozo A. V. Metodika TIM rascheta trekhmernykh zadach mekhaniki sploshnykh sred na nestrukturirovannykh mnogogrannykh lagranzhevykh setkakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2005. Vyp. 3. S. 37–52.

 Потехин А. Л., Тарасов В. И., Фирсов С. А., Логинов И. В., Никитин В. А., Кузнецов М. Г., Попова Н. В., Деманова А. К., Козачек Ю. В. ScientificView — параллельная система пост-обработки результатов, полученных при численном моделировании физических процессов // Там же. 2008. Вып. 4. С. 37-45.

Potekhin A. L., Tarasov V. I., Firsov S. A., Loginov I. V., Nikitin V. A., Kuznetsov M. G., Popova N. V., Demanova A. K., Kozachek Yu. V. ScientificView — parallelnaya sistema post-obrabotki rezultatov, poluchennykh pri chislennom modelirovanii fizicheskikh protsessov // Tam zhe. 2008. Vyp. 4. S. 37—45.

Статья поступила в редакцию 04.03.19.

AN ALGORITHM OF ITERATIVELY CORRECTING DETONATION TIMES BY MEANS OF ACCOUNTING THE MOVING DETONATION WAVE DIRECTION IN "LEGAK" CODE / N. A. Volodina, S. A. Krayukhin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region).

The paper describes several methods to improve the accuracy of the basic step-by-step algorithm of computing the perfect HE detonation used in the LEGAK code. The paper is focused on the description of the algorithm of iteratively correcting the HE initiation time owing to the account for the direction of a moving detonation wave. The calculated results for several methodological problems of detonation waves propagating in HE are given to demonstrate the algorithm applicability.

*Keywords*: high-explosive, perfect detonation, detonation initiation time, a detonation wave propagation velocity, detonation wave front.

УДК 519.6

# КОМПЛЕКС ПРОГРАММ GROUND2 ОБРАБОТКИ ОЦЕНЕННЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ И РАСЧЕТА СИСТЕМ ГРУППОВЫХ КОНСТАНТ

## А. В. Алексеев, А. В. Бнятов, Н. А. Крутько, С. С. Раткевич (ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Приводится описание комплекса программ GROUND2, предназначенного для обработки оцененных ядерных данных и расчета единых согласованных систем групповых констант взаимодействия нейтронов, гамма-квантов и быстрых заряженных частиц с ядрами изотопов. Представлена структура комплекса программ, возможности программной оболочки GDF комплекса, а также технология задания входных данных и проведения расчетов спектральных и групповых характеристик взаимодействия частиц с ядрами. Показаны возможности комплекса в части хранения и визуализации групповых данных.

*Ключевые слова:* константное обеспечение, процессинговый код, база данных, оцененные ядерные данные, система групповых констант.

#### Введение

В константном обеспечении нейтроннофизических расчетов большой популярностью пользуются пакеты программ обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант NJOY [1], PREPRO [2]. В России наряду с указанными программами получили известность пакеты ГРУКОН (РНЦ "Курчатовский институт") [3, 4], CONSYST (ГНЦ РФ-ФЭИ) [5]. Все они реализуют концепцию последовательной обработки файлов оцененных ядерных данных, как правило, в международном формате ENDF/B [6] и усреднения их в групповые константы взаимодействия частиц с ядрами различных изотопов. Полученные групповые величины в итоге формируют системы групповых констант соответствующего назна-Архивы групповых констант обычно чения. представляют собой файловые хранилища, реализованные на локальных или сетевых ресурсах общего либо администрируемого доступа.

В 2011 г. в РФЯЦ-ВНИИЭФ была создана первая версия комплекса программ константного обеспечения GROUND [7—9], в которой были реализованы функции информационносправочной системы (визуализации оцененных и групповых данных) совместно с обработкой оцененных данных, расчетом и тестированием групповых констант в рамках единой интегрированной среды. При этом все данные в комплексе GROUND, в том числе рассчитываемые групповые константы вместе с параметрами расчетов, хранились в единой базе данных (БД). Можно сказать, что в этом программном пакете был достигнут предельный уровень интеграции хранения ядерных данных, технологии расчета и пользовательского интерфейса, что проиллюстрировано на рис. 1.

В процессе эксплуатации стало понятно, что в качестве единого инструмента для анализа ядерных данных и расчета групповых констант комплекс GROUND является довольно "тяжеловесным" продуктом, хотя и покрывающим все потребности в их визуализации и обработке. Причиной послужило хранение всех классов ядернофизических данных и рассчитанных групповых констант в единой БД. Кроме того, методика численного моделирования переноса быстрых заряженных частиц и их энергии, остро нуждавшаяся в согласованных системах групповых констант взаимодействия нейтронов и быстрых заряженных частиц с ядрами изотопов, получила новое развитие. Эти предпосылки побудили авторов к пересмотру программной архитекту-



Рис. 1. Главное окно первой версии комплекса GROUND

ры комплекса GROUND и явились достаточным основанием для разработки его следующей версии — GROUND2.

# Структура комплекса программ константного обеспечения GROUND2

Вторая версия комплекса программ GROUND построена по модульному принципу разделением на информационно-справочную систему ядерно-физических данных NDX2 и программную платформу GDF. Последняя является оболочкой управления расчетом единых согласованных систем групповых констант — объединений для выбранного множества изотопов групповых данных, характеризующих взаимодействия рассматриваемых частиц (нейтронов, гамма-квантов, быстрых заряженных частиц) с ядрами этих изотопов. Групповые данные для каждого типа взаимодействия (пары налетаю*щая частица — ядро*) согласованы между собой посредством групповых разбиений по энергии как налетающих, так и рождающихся в реакциях частиц рассматриваемых типов.

БД GROUND также была разделена на два логических блока: БД CPND — исходные данные (оцененные, экспериментальные, справочные и т. д.) и БД GROUND2 — результирующие групповые константы. Стоит отметить, что вместе с групповыми константами в БД GROUND2 хранится еще и технологическая информация о входных параметрах счетных модулей, задействованных в цепочках подготовки групповых констант. На рис. 2 представлена структура комплекса константного обеспечения GROUND2.

БД CPND (Collection of Preprocessed Nuclear Data) служит источником оцененных данных при подготовке систем групповых констант для задач моделирования переноса частиц, а также содержит полный набор данных для визуализации их в информационно-справочной системе NDX2:

- скалярные интегральные характеристики ядер (массы и энергии реакций);
- данные по уровням возбуждения и переходам ядер ENSDF;
- оцененные данные из библиотек в формате ENDF/B;
- экспериментальные данные EXFOR.

Ввод данных всех классов в БД CPND из источников публикации в сети Интернет осуществляется посредством специализированных утилит — конвертеров данных.

БД GROUND2 предназначена для хранения рассчитанных групповых микроконстант взаимодействия частиц с ядрами изотопов совмест-



Рис. 2. Структура комплекса константного обеспечения GROUND2

но с параметрами их расчетов. Это продиктовано потребностями технологии их подготовки и необходимостью отслеживания и возможного воспроизводства всех этапов обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант. БД GROUND2 является источником групповых данных для программных комплексов — потребителей многогрупповых констант, а также программы GX2 визуализации групповых ядерных данных.

Обработка оцененных ядерных данных и расчет согласованных единых систем групповых констант взаимодействия нейтронов, гаммаквантов и быстрых заряженных частиц осуществляются в программной оболочке GDF.

# Программная оболочка GDF подготовки групповых микроконстант

Основное назначение программной оболочки GDF — организация многоэтапного процесса расчета единых согласованных систем групповых констант. При этом решаются задачи организации запуска счетных модулей, хранения и управления потоками промежуточных данных, подготовки и передачи счетным модулям управляющих параметров расчетов. Программа GDF полностью выполняет функции обмена данными с сетевыми БД. При этом достигаются следующие цели:

- исключение необходимости прямого доступа к БД со стороны счетного обрабатывающего кода, реализованного преимущественно на языке Фортран, в котором работа с сетевыми БД является определенной технической проблемой;
- логическая изоляция счетного кода от реальной структуры хранения данных.

**Организация расчетов.** Групповые данные в комплексе GROUND2 рассчитываются из исходных оцененных данных в формате ENDF/В в несколько последовательно выполняемых счетными модулями этапов. Счетный модуль оформлен в OC Windows в виде консольного приложения. Счетный модуль получает входные данные, являющиеся результатами расчетов одного или нескольких модулей-предшественников в общей последовательности расчета, и генерирует свой выходной файл-результат. При запуске счетный модуль получает в отдельном файле управляющие параметры расчета и в процессе работы выводит на экран собственный служебнодиагностический протокол расчета (листинг). Таким образом, программа GDF выступает в качестве единой оболочки — среды проведения расчетов.

С точки зрения пользователя GDF — это инструментарий для поэтапной подготовки единой согласованной системы групповых констант. Рассмотрим эти этапы подробнее:

- 1. Заготовка основных сеточных величин. На этом и последующих этапах GDF используется для навигации по данным БД GROUND2, логически представленным как единая древовидная структура. На данном этапе осуществляется редактирование базовых объектов параметров расчетов — однои двумерных числовых массивов (рис. 3), например, сеток по энергии частиц, сеток по температуре, сечению разбавления и т. п.
- 2. Формирование последовательностей счетных модулей, используемых для обработки оцененных данных и расчета групповых констант. На этом этапе осуществляется выбор рассматриваемых налетающих частиц и формирование последовательности счетных модулей для каждого из типов взаимодействия (пары частица—ядро) (рис. 4).
- 3. Задание наборов входных параметров счетных модулей (рис. 5). Здесь для каждого выбранного счетного модуля формируется один или несколько наборов входных параметров, так как для разных последовательностей, в которые входит счетный модуль, могут использоваться разные наборы его входных параметров.
- 4. Формирование сценариев расчетов. Сценарий это конкретизированная последовательность счетных модулей, где для каждого из них указан один из заранее заготовленных наборов входных данных (рис. 6). Последовательность счетных модулей может содержать несколько сценариев расчетов.
- 5. Создание системы констант. После заготовки необходимых сценариев расчетов можно приступать к созданию новой или изменению существующей системы групповых констант. Все операции над системами констант осуществляются в узле Systems дре-

вовидной структуры данных (рис. 7). Здесь следует указывать перечень частиц (нейтрон, гамма-квант, протон, дейтрон, тритон, гелион, альфа), взаимодействие которых с ядрами изотопов будет учтено в данной системе групповых констант. Для каждой частицы следует указать групповое разбиение по ее энергии.

- 6. Включение изотопов в систему констант и привязка их к сценариям расчетов. Данная операция выполняется в рамках выбранной системы групповых констант из узла Systems. Для каждого включенного изотопа следует указать источник его оцененных данных и сценарий расчета. Привязку изотопов к библиотекам оцененных данных и сценариям расчетов можно выполнять как групповую операцию (рис. 8). Здесь же при необходимости выполняется удаление изотопов из рассчитываемой системы групповых констант.
- 7. Проведение полного цикла расчета групповых констант со сквозным контролем процесса (рис. 9). После наполнения системы групповых констант данными по изотопам можно приступать к расчету групповых констант по каждому сценарию каждой используемой для этого последовательности счетных модулей. Карта рассчитываемой системы групповых констант в программной оболочке GDF представляется графически (см. рис. 9).

Особое внимание в программной оболочке GDF уделено контролю процесса расчета на всех этапах. Программа обеспечивает:

- визуальный интерфейс контроля состояния расчета и различные режимы его проведения (ручной и автоматический);
- параллельный запуск логически независимых счетных модулей (используется многопоточность, свойственная современному аппаратно-программному окружению ПЭВМ);
- хранение промежуточных результатов расчетов в локальном файловом хранилище с закрытой внутренней структурой, что означает логическую изоляцию счетных программ от реальной структуры хранилища;
- перенаправление экранного консольного вывода счетных программ в оболочку с сохранением протокола в локальном хранилище

Group Data Factory		-			1. demonst	
Data Options						Abo
GROUND2	^ ID	Точек	Описание	Используется	<ul> <li>Идентификаци</li> </ul>	R
- Groups		1	Нулевая сетка (D)	CROSUM.127	ID	14
Grids	3	2	Комнатная температура 293 К		Описание	BB3P: 0, 293, 350, 400, 450, 500, 550, 600
GU	4	2	0.0253 eV		<ul> <li>4 1. Данные</li> </ul>	
MU	8	6	Т=0. 0.025. 25. 30. 50. 100 эв	CROSUM.80	Единицы	к
- SIG	9	9	Standard 9-point	CROSUM.102	N	11
⊖-T	n 1	0 10	Standart 9 point + 0.1 key		<ul> <li>T[N]</li> </ul>	Maccив Single[]
— Нулевая сетка (0)		1 10	Created for GEMUS CMK 701A1069		[0]	0
<ul> <li>Комнатная температура 293 К</li> </ul>		3 11	сетка температур для расчета 88ЭР		[1]	293
-0.0253 ev		4 11	883P: 0. 293. 350. 400. 450. 500. 550. 600. 650. 800. 1000		[2]	350
- 1=0, 0.025, 25, 30, 50, 100 38		6 12	BBЭР: от 0 до 1500		[3]	400
Standard 9-point		7 13	883P: +1500. 2000K	CROSUM.103	[4]	450
- Created for GEMUS CMK 701A1059	- 3	2 3	0, 293, 550 K	CROSUM.120	[5]	500
- cetta tempenatyp dag pacyeta BB3P	3	3 4	0, 293, 500, 1000 K	CROSUM.121	[6]	550
- BB3P: 0, 293, 350, 400, 450, 500, 550, 600, 650,					[7]	600
— ВВЭР: от 0 до 1500 — ВВЭР: +1500, 2000К	-				Т(N) Массив точек Т - отсо	ротирован по возрастанию.
	1		M	,	Диапазон: [0, 1Еб].	

Рис. 3. Навигация по данным и редактирование базовых объектов в программе GDF

Data Options	About
GROUND2	46.Новая последовательность создана 31.01.2019 10:27:11
<ul> <li>Grids</li> <li>Weights</li> <li>Orders</li> <li>Sequences</li> <li>Default empty sequence</li> <li>Стандартная последоватея</li> <li>Стандартная последоватея</li> <li>Стандартная последоватея</li> <li>Последовательность для д</li> <li>Последовательность для д</li> <li>Последовательность для д</li> <li>Последовательность для л</li> </ul>	EXTRACT       + + ×       + * CROSUM       + + ×       MATRUM       + * ×       MATRUM       CROSUM       CT, RECONR, CROSUM, MATRUM       CT, RECONR, CROSUM, RECONR, CROSUM, RECONR, CROSUM, RECONR, CROSUM, RECONR, CROSUM, RECONR, CROSUM, RECONR,
Расчет констант H(H2O) дл Константы для 883Р (кром Константы гамма-образов Расчет нейтронно-ядерньо Расчёт PMK2 Расчёт PMK2 T Testing ERRORR Test ERRORR+RMK2 123 10	Pesyne tami проверки Проверить 46 n EXTRACT, RECONR, CROSUM, MATRUM, UNRESR, RMK, FINAL + 4 m + 1 Personal Parameter Param

Рис. 4. Формирование последовательностей счетных модулей для обработки оцененных данных и расчета групповых констант

Data Options						About
GROUND2	ID	Описание	Используется	-	0.Идентификация	
Groups	86	THERMR default parameters created at 04.04.2016 11:45:56			ID	87
- Grids	119	THERMR free gas			Description	THERMR H(H2O)
Weights	87	THERMR H(H2O)	48.H(H2O), 55.Free gas		1.Расчёт неупругого	рассеяния
Orders					Материал	Нет
- EXTRACT					Тип расчёта	Чтение S(a,b) и расчёт мат
B RECONR					Файл с MF=7	ENDFB-71\TSL\H(h2o).dat
⊕ CROSUM					2.Параметры	
⊕ UNRESR E					Tmax	10
- MATRUM					NL	10
THERMR					EPS	0.001
-86.THERMR default param				-11		
- 119.THERMR free gas						
-87.THERMR H(H2O)						
- KMK						
GAMINK						
- RMK2						
GROOPRID				1	•	
ERRORR ERRORR						
- FINAL				- 1	депификатор наоора,	tannow o off

Рис. 5. Редактирование наборов входных параметров счетного модуля RMK в программе GDF

Description         Difference         CODE/         CODE/         CodE/         MATERIAL         Difference         PAUL           - Product registry (C) product registr	Data Options									
<ul> <li>- Order and profits registeries</li> <li>- Discretion registeries</li> <li>- Discretion</li></ul>	© Sequences	RECONR		CROSUM		UNRESR	MATRUM		RMK	FINAL
Characteristic and a state in the constraint of the constrain	- Default empty sequence	98.Стандартные параметр		302.Зависимость о	T ANN POULHINK-1 .	108.5es yvera T # 50	85.3aeacamaters o	T ANN POURHING +	106 RMK MATRUM	- 109.FINAL n
Decologicalitationsche date exceptional     Decologicalitationsche date exceptionalitation     Decologicalitation     Decologica	Спадартна посадователности д     Спадартна посадователности д     Спадартна посадователности д     Спадартна посадователности д     Тородователности ди ли фран     Тородователности     Тородователности ди ли фран     Тородователности     Тородователности ди ли фран     Тородователности     Тородователности	O Standard Construction     O Standard Constandard     O Standard Constandard     O Standard Constandard	Alay Travel August Type	Algorendees     Description     Lereon sale     Cens Gal     Cens Gal     Cens All     Cens Mu     Cens Mu     Cens Mu     Cens T     Eamoust T     Brock     Software St     Software St	Image: Second	El Escaverse professioners professioners     El Escaverse professioners en el Escaverse el	Algerender     Description     Thispacetype     Trans     Trans     N     PS     Internationation     N     PS     Internations     N     E[N4]	annes 85 Janesons et Tyne Po- et Her 10000 10 0001 10 000000	Olymonopenages     Di     Di	A Mannedevaue     To 200     Description 7994 in     Description     Description
	<ul> <li>Последовательность для ковариаци</li> <li>Сценарий расчета ковариацион</li> </ul>	ID Идентификатор набора да	анных в БД	ID Идентификатор н	ибора данных в БД	ID Идентификатор набора данных в БД	ID Идентификатор н	чабора данных в БД	ID Идентификатор набора данных в БД	ID Идентификатор набора данных в

Рис. 6. Формирование сценария расчета групповых констант

ata Options							Abo
GROUND2	ID	Имя	Описание	Частицы	Изотопов	<ul> <li>Идентификация</li> </ul>	
Groups	22	NG1	Test system n+g	n.p	9	ID	22
- Grids	30	test1026	vsaa1026 test of gro New	n	62	Mara	NG1
- Weights	38	vvra9120	wwer reactor calculat Copy Ctrl+C	n	120	Описание	Test system n+g
- Orders	41	test	Новая система созд Paste Ctrl+V	g.n.g.p.d.t.h.a	16	<ul> <li>4 1.0. Частицы</li> </ul>	
Sequences	42	System42	HOBAR CHCTEMA CO3A Delete Ctrl+Del	g. n. g'. p. d. t. h. a	10	Частицы	n, p
<ul> <li>Systems</li> </ul>	44	testing	Сравнительное тестирование	q. n. q'	17	<ul> <li>4 1.1. Нейтрон</li> </ul>	
-NG1	82	dt_test	Новая система создана 05.10.2017 14:09:24	d	1	Групповое разбиение	377.2 группы (тест 1 рмк2)
-test1026	90	etaltest	Тестовая система для сдачи в ФПП	g, n, g', p, d, t, h	1	Число групп	2
- VW/a9120	93	System92	Новая система создана 02.07.2018 14:03:28	n, p	1	Границы групп	Maccus Single[]
Custom 12	96	System96	Новая система создана 31.07.2018 9:14:34	n.p	1	Основной сценарий	65.РМК2 без температур
tection	97	rmk24	Новая система создана 31.07.2018 15:58:50	n.p.d.t.h.a	4	<ul> <li>1.3. Протон</li> </ul>	
- dt test	110	ERRORRA	Testin ERRORR system	n, p, d, t, h, a	3	Групповое разбиение	377.2 группы (тест 1 рмк2)
etaltest	112	sense1	Расчет ковариационных матриц для получения константной погрег	шности Кэф n	4	Число групп	2
- System92						<ul> <li>Границы групп</li> </ul>	Maccus Single[]
- System96						Основной сценарий	40.Сценарий для протонов
- rmk24						<ul> <li>А. Изотопы</li> </ul>	
ERRORRA						Общее количество	9
sensel						> Список	Maccus String[]
						Границы групп Массив границ групп, МаВ	

Рис. 7. Информация о системах групповых констант

Options								Abo
OUND2		Расчёт данных Управление данными в Е	д					
Groups Grids		Изотопы 🕨 🖬 🖶 👾 👾 📢	¢					Не выбрана ячейка таблицы
Weights		Изотс Ча Данные Cu SPID	Ctatyc EXTRACT RECONF CROSS	UNRESP	MATRUM	RMK FINAL		Параметры приказа
Orders	- 11	Hol n ENDF8-71'NGE\H-1 42 42177	010010010 Останов 🕶 0 98 102	83	85 1	106 109		
Sequences Systems	_	H-1 p ENDFB-71\PGE\H-1 40 40178	110010010 Останов 🕶 0 78	108	1	118 110	_	
-NG1	ж изото	опов в системе 22.NG1		100	100 million (1		0	
-test1026	отопы	п - нейтрон						
- vvra9120								
- System42								
- testing X - dt_test X - etaltest X - System92 X	H-1	ENDFB-71\NGE • 42 •	32.Сценарии для 6341 60. сценарий для протонов					
	H-2	ENDFB-71\NGE • 42 •	61.Расчет групповых констант нейтр 65.РМК2 без температур					
	H-3	ENDFB-71\NGE • 42 •	ENDFB-71\PGE • 40 •					
- System96	He-3	ENDER-71\NGE 42 +	ENDER-71\PGE + 40 +					Редактировать
-rmk24	ine s							Состояние исполнения приказа
sensel	He-4	ENDFB-71\NGE • 42 •	• 40 •					
x	W-184	ENDFB-71\NGE • 47 •					- 1	
x	Pt	ROSFOND\NGE • 47 •						
x	U-235	ENDFB-5\NGE + 47 +						
X	Pu-239	9 ENDFB-71\NGE + 47 +						
							lose	Запуск Останов Сброс

Рис. 8. Выбор изотопов и их привязка к библиотекам оцененных данных и сценариям расчетов



Рис. 9. Программная оболочка GDF в режиме управления расчетом групповых констант

для последующего анализа и диагностики результатов.

Таким образом, принципиальным новшеством комплекса GROUND2 является гибкое задание последовательности выполняемых программ для каждого типа взаимодействия (пары частица*usomon*), включенного в систему групповых констант, а также входных параметров расчета для каждого счетного модуля этой последовательности. С практической точки зрения это позволяет, например, в рамках одной системы групповых констант рассчитывать и хранить групповые характеристики нейтронно-ядерных реакций для разных сеток по температуре или сечениям разбавления, с учетом или без учета зависимости функции рассеяния от теплового движения ядер и т. п. За интерпретацию и редактирование входных данных каждой счетной программы "отвечает" его собственный автономный программный модуль-адаптер данных. Программа GDF при этом реализована по технологии плагинов (подключаемых программных модулей, расширяющих функциональные возможности программы): ядро — ведущий исполняемый файл GDF.EXE, осуществляющий навигацию по данным, статическое редактирование списочных и табличных объектов данных, управление расчетом, и набор плагинов-адаптеров для задания входных параметров счетных программ. Плагины-адаптеры оформлены в виде динамических библиотек DLL. Их интеграция с головным модулем GDF.EXE осуществляется по стандартизованному программному интерфейсу (АРІ) и соглашению о размещении файлов. Эти модули-плагины не зависят непосредственно от GDF.EXE, а опираются на общую с ним программную инфраструктуру и могут разрабатываться как отдельные проекты.

Исходя из вышесказанного, программу GDF можно классифицировать как клиентское приложение БД CPND оцененных ядерных данных и БД GROUND2 групповых констант и параметров их расчета, которое одновременно является управляющей оболочкой для внешних счетных программ, обладающей модульной архитектурой для формирования входных данных и передачи их счетным программам комплекса.

### Программы обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант

Программная платформа GDF изначально проектировалась как программная оболочка управления расчетами конвейерного типа, когда результаты расчетов одной счетной программы являются входными данными для следующей счетной программы. К таким расчетам относятся последовательная обработка оцененных ядерных данных и расчет групповых констант различных типов ядерного взаимодействия. В таблице представлен список счетных программ, входящих в состав комплекса константного обеспечения GROUND2. Дерево этих счетных модулей в комплексе GROUND2 представлено на рис. 10.

Как видно из таблицы, часть счетных модулей комплекса GROUND2 заимствована из процессингового кода NJOY. Программы CROSUM

#### Список программ обработки оцененных ядерных данных и расчета групповых констант комплекса GROUND2

Модуль	Назначение, класс решаемых задач
EXTRACT	Получение оцененных данных изотопа из БД CPND, формирование файла исходных
	спектральных ядерных данных в формате ENDF/B
RECONR	Восстановление сечений из резонансных параметров в области разрешенных резонансов [1]
CROSUM	Расчет сечений нейтронно-ядерных реакций от теплового и газодинамического движения
	ядра [10, 11]
MATRUM	Расчет энергоугловых распределений упругорассеянных нейтронов от теплового и
	газодинамического движения ядра [10, 11]
THERMR	Расчет энергоугловых распределений упругорассеянных нейтронов от теплового движения
	ядра с учетом химических связей атомов [1]
UNRESR	Расчет эффективных самоблокированных сечений нейтронно-ядерных реакций в области
	неразрешенных резонансов [1]
GAMINR	Расчет групповых анизотропных констант фотоатомного взаимодействия (гамма-
	прохождения) [1]
RMK, RMK2	Расчет групповых анизотропных нейтронных констант, констант гамма-образования и
	взаимодействия быстрых заряженных частиц с ядрами [1, 12]
ERRORR	Расчет групповых ковариационных матриц [1]
FINAL	Объединение групповых констант различных типов взаимодействия с ядрами изотопов в
	единую систему групповых констант, контроль корректности данных
STORE	Помещение системы групповых констант в БД GROUND2



Рис. 10. Дерево счетных модулей для обработки оцененных ядерных данных и расчетов групповых констант

и MATRUM являются в некоторой степени аналогами программ BROADR и THERMR комплекса NJOY. Они позволяют рассчитывать зависимости сечений нейтронно-ядерных реакций не только от теплового, но и от газодинамического движения ядер изотопов. Программа RMK2 [12] предназначена для расчета групповых констант взаимодействий нейтронов и быстрых заряженных частиц с ядрами изотопов, в результате которых рождаются вторичные нейтроны и заряженные частицы. По своим функциональным возможностям программа RMK2 близка к программе GROUPR комплекса NJOY, однако наряду с общепринятыми характеристиками процессов она рассчитывает групповое распределение кинетической энергии продуктов реакций и групповое энерговыделение реакций с учетом энергии вторичных частиц. Также в случае отсутствия данных по угловым или энергоугловым распределениям возможен расчет констант для двухчастичных или многочастичных реакций в приближении изотропного распределения продуктов реакции в системе центра масс или приближении равенства *N*-частичных фазовых объемов соответственно.

Единая система групповых констант. Как уже было сказано, программа GDF организует и контролирует многоэтапный расчет групповых констант для каждого взаимодействия частица-изотоп, по завершении которого получается множество файлов групповых констант в формате GENDF [1] или производном от него формате. Этапом, предшествующим записи групповых данных в БД GROUND2, является объединение для каждого изотопа множества файлов групповых констант, описывающих взаимодействие выбранного набора частиц с данным изотопом. В комплексе GROUND2 эта операция осуществляется программой FINAL, которая, кроме объединения групповых данных конкретного изотопа в один файл, выполняет также операции контроля физической и форматной корректности рассчитанных групповых данных и создания суммарных реакций из указанного перечня исходных групповых величин (например, реакции суммарного неупругого рассеяния из групповых данных для уровней неупругого рассеяния MT = 51, ..., 91 в терминологии формата ENDF). Это позволяет существенно экономить время расчета макроскопических констант, дисковую и оперативную память для хранения групповых данных.

Логическая структура единой системы групповых констант представлена на рис. 11. При ее разработке ключевыми вопросами являлись согласованность данных и их максимально компактное хранение (только уникальных данных). Концепция единой системы групповых констант отвечает следующим требованиям:

- 1. Система групповых констант содержит для каждого изотопа согласованный по энергетическим разбиениям набор групповых величин, характеризующих взаимодействие этого изотопа с конкретной налетающей частицей.
- 2. Изотоп является основным объектом, с которым производятся операции с точки зрения потребления единой системы групповых констант. Он содержит ссылки на групповые константы для каждой фиксированной налетающей частицы (каждого типа взаимодействия).
- 3. Характеристики взаимодействия изотопа с конкретной частицей (групповые константы) являются уникальными и неделимыми и посредством механизма ссылок могут использоваться (но только целиком!) более чем в одном изотопе. Этот механизм применяется в случае отсутствия необходимых ядерных данных для какого-либо взаимодействия частица—изотоп.
- 4. Каждая реакция в общем случае является многочастичной, т. е. в результате нее может продуцироваться множество различных вылетающих частиц (в том числе ни одной). При этом для фиксированной частицы используется одно и то же энергетическое разбиение вне зависимости от того, является частица налетающей или вылетающей.

Структура единой системы групповых констант не является жестко фиксированной, а построена по принципу графа, в котором вершинами являются логические объекты, а все ребра помечаются при помощи целочисленного или строкового атрибута, что также делает их различимыми между собой. Это позволяет пополнять систему групповых констант новыми классами данных произвольной структуры без влияния на потребителей. То есть если в системе появятся новые данные, а программа-потребитель еще "не умеет" их обрабатывать, то они будут проигнорированы, в то время как требуемые данные будут обработаны в обычном режиме. Таким спо-



Рис. 11. Логическая структура единой системы групповых констант

собом обеспечивается стабильность выполнения программ — потребителей групповых констант.

#### Визуализация групповых данных

Для отображения групповых данных в комплексе программ константного обеспечения GROUND2 используется программа GX2. Она является инструментом обзора и графической визуализации содержащихся в БД GROUND2 рассчитанных групповых величин — микроскопических групповых констант ядерно-физических процессов. Имеющиеся в GX2 средства табличного и графического представления данных предназначены для визуального анализа пользователем содержимого систем групповых констант с целью выработки

рекомендаций по их использованию в расчетах задач переноса нейтронов, гамма-квантов и быстрых заряженных частиц. На рис. 12 представлен пример табличной визуализации спектра мгновенных нейтронов деления <sup>235</sup>U.

Для графического отображения групповых величин в комплексе GROUND2 используется служебная программа APS. Она создана на основе клиент-серверной технологии передачи данных через оперативную память, что позволяет в общем случае использовать ее для отображения графических зависимостей из различных программ-поставщиков. Например, можно на одном графике отобразить экспериментально измеренные, оцененные спектральные и групповые сечения ядерных реакций (рис. 13).



Рис. 12. Пример табличной визуализации группового спектра нейтронов деления  $^{235}$ U в программе GX2



Рис. 13. Пример графического отображения сечения деления  $^{235}$ U из разных источников: I - экспери-ментальные данные EXFOR; — оцененные данные ENDF/B-6; — групповые данные БД GROUND2

#### Заключение

В РФЯЦ-ВНИИЭФ создан комплекс программ GROUND2, предназначенный для обработки оцененных ядерных данных и расчета систем групповых констант различных типов ядерных взаимодействий. Основными его особенностями являются:

- представление системы групповых констант в виде объединения групповых данных по всем типам взаимодействия с возможностью хранения данных для многочастичных реакций;
- гибкая структура системы групповых констант, основанная на хранении данных в виде направленного графа, которая позволяет расширять и пополнять ее любыми данными без влияния на ранее разработанные программы;
- открытая модульная архитектура;
- программная оболочка GDF подготовки и проведения расчетов систем групповых констант на основе технологии подключаемых модулей с многопоточным автоматическим расчетом групповых констант, гибким формированием последовательностей расчетов и сценариев их проведения;
- развитый инструментальный сервис по табличному и графическому отображению рассчитанных групповых величин.

Программные технологии, использованные при создании комплекса программ GROUND2, позволят внедрять в систему константного обеспечения РФЯЦ-ВНИИЭФ новые классы ядернофизических данных, а также организовать расчеты новых характеристик ядерных взаимодействий без каких-либо критических изменений как в структуре комплекса константного обеспечения, так и в программах — потребителях групповых констант.

#### Список литературы

- MacFarlane R. E., Muir D. W., Boicourt R. M., Kahler A. C., Conlin J. L. The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016. Document LA-UR-17-20093. 2016.
- 2. Cullen D. E. PREPRO 2007, 2007 ENDF/B Pre-processing Codes (ENDF/B-VII Tested). LLNL, USA; The Nuclear Data Section,

International Atomic Energy Agency (IAEA), Vienna, Austria.

- Синица В. В., Абагян Л. П., Базазянц Н. О., Николаев М. Н. ГРУКОН — библиотека программ расчета групповых констант. М.: Атомиздат, 1973. Sinitsa V. V., Abagyan L. P., Bazazyants N. O., Nikolaev M. N. GRUKON — biblioteka programm rascheta gruppovykh konstant. M.: Atomizdat, 1973.
- 4. Sinitsa V. V., Rineisky A. A. GRUKON Package of Applied Computer Programs and Operating Procedures of Functional Modules. Rep. INDS(CCP)-344. Vienna, 1993.
- Manturov G. N., Nikolaev M. N., Tsiboulya A. M. CONSYST code. Preprint IPPE-2828, 2000.
- ENDF-6 Formats Manual. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF-B/VII / Ed. by M. Herman and A. Trkov // CSEWG Document ENDF-102. Report BNL-90365-2009, Rev. 1. Brookhaven National Laboratory, 2010.
- 7. Алексеев А. В., Крутько Н. А., Касаткин C. C. Программный комплекс GROUND константного обеспечения ядерно-физическими данными // 66-я Межд. конф. "ЯДРО-2016" по проблемам ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Саров, 11-14 октября 2016 г. Alekseev A. V., Krutko N. A., Kasatkin S. S. Programmy kompleks GROUND konstantnogo obespecheniya vadernofizicheskimi dannymi // 66-ya Mezhd. konf. "YADRO-2016" po problemam yadernoy spektroskopii i strukture atomnogo yadra. Sarov, 11–14 oktyabrya 2016 g.
- 8. Алексеев А. В., Бнятов А. В., Касаткин С. С., Крутько Н. А. Программный комплекс GROUND константного обеспечения ядерно-физическими данными // "Супервычисле-XIV Межд. конф. ния и математическое моделирование". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 27-38. Alekseev A. V., Bnyatov A. V., Kasatkin S. S., A. Programmy kompleks Krutko N. GROUND konstantnogo obespecheniva yaderno-fizicheskimi dannymy // XIV Mezhd. konf. "Supervychisleniya i matematicheskoe

modelirovanie". Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2012. S. 27—38.

- Крутько Н. А., Алексеев А. В., Касаткин С. С., Бнятов А. В. Система константного обеспечения нейтронно-физических расчетов РФЯЦ-ВНИИЭФ (GROUND). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015616186. *Krutko N. A., Alekseev A. V., Kasatkin S. S., Bnyatov A. V.* Sistema konstantnogo obespecheniya neytronno-fizicheskykh raschetov RFYaTs-VNIIEF (GROUND). Svidetelstvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2015616186.
- Гончаров Г. А., Горелов В. П., Фарафонтов Г. Г. Особенности перехода к многогрупповому приближению при учете направленного движения ядер среды в шаре и телах вращения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 25—29.

Goncharov G. A., Gorelov V. P., Farafontov G. G. Osobennosti perekhoda k mnogogruppovomu priblizheniyu pri uchete napravlennogo dvizheniya yader sredy v share i telakh vrashcheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1991. Vyp. 2. S. 25–29.

11. Учет теплового и направленного движения

ядер среды в многогрупповых нейтронных расчетах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1991. Вып. 2. С. 18—23.

Uchet teplovogo i napravlennogo dvizheniya yader sredy v mnogogruppovykh neytronnykh raschetakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 1991. Vyp. 2. S. 18–23.

12. Алексеев А. В., Барабанова Д. С., Бнятов А. В., Колобянина Н. В., Мэкачих С. В. Методика и программа расчета групповых констант для двухчастичных и многочастичных реакций // XXIX науч.-тех. конф. "Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики (Нейтроника-2018)". Обнинск, 2018 г.

Alekseev A. V., Barabanova D. S., Bnyatov A. V., Kolobyanina N. V., Mzhachikh S. V. Metodika i programma rascheta gruppovykh konstant dlya dvukhchastichnykh i mnogochastichnykh reaktsiy // XXIX nauch.-tekh. konf. "Neytronno-fizicheskie problemy atomnoy energetiki (Neytronika-2018)". Obninsk, 2018 g.

Статья поступила в редакцию 18.02.19.

THE "GROUND2" SOFTWARE SYSTEM FOR EVALUATED NUCLEAR DATA PROCESSING AND GROUP CONSTANT SYSTEMS CALCULATION / A. V. Alekseev, A. V. Bnyatov, N. A. Krutko, S. S. Ratkevich (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, Nizhny Novgorod Region).

The paper describes the GROUND2 software system for the processing of evaluated nuclear data and calculation of unified self-consistent systems of group constants for interactions of neutrons, gammas, and fast charged particles with nuclei of isotopes. The software system structure and capabilities of the GDF program shell, as well as the procedure of setting input data and calculating spectral and group characteristics of the interaction of particles with nuclei are presented. The software system capabilities of storing and visually representing the group data are demonstrated.

 $Keywords\colon$  provision of group constants, processing code, database, evaluated nuclear data, group constants system.

## УДК 519.6

# МЕТОДЫ БАЛАНСИРОВКИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ НАГРУЗКИ В МЕТОДИКЕ "ТИМ"

## С. С. Соколов, И. Г. Новиков, А. А. Воропинов, Т. Н. Половникова (ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Рассматриваются методы балансировки вычислительной нагрузки, реализованные в рамках методики ТИМ. Описывается набор критериев для проведения динамической и квазидинамической балансировок. Динамическая балансировка заключается в переносе расчета ячеек с одного процесса на другой, квазидинамическая — в полной переинициализации данных для задачи без остановки ее расчета и построении новой декомпозиции. Рассмотрены области применения алгоритмов динамической и квазидинамической балансировок.

Применение методов балансировки вычислительной нагрузки позволяет эффективно загрузить процессорное поле, выделенное на задачу, и ускорить счет.

*Ключевые слова:* методика ТИМ, декомпозиция, динамическая балансировка, квазидинамическая балансировка, критерии оценки качества декомпозиции.

#### Введение

Методика ТИМ [1, 2] предназначена для решения многомерных нестационарных задач механики сплошных сред с использованием лагранжева подхода на неструктурированных многогранных сетках произвольного вида. По данной методике можно рассчитывать широкий набор процессов: газовую динамику и упругопластичность, детонацию, теплопроводность, магнитную гидродинамику с учетом диффузии магнитного поля, многопотоковую газовую динамику и др. По методике ТИМ рассчитываются задачи в многообластной постановке. При этом, как правило, каждое вещество выделяется в отдельную область. Между областями решается задача контактного взаимодействия. Смесь веществ не допускается.

Для повышения точности расчетов необходимо выполнять численное моделирование на сетках с большим количеством ячеек. Такие расчеты требуют значительного календарного времени. Один из путей его сокращения — проведение расчетов в параллельном режиме счета.

В методике ТИМ используется метод трехуровневого распараллеливания [3]. На первом (верхнем) уровне осуществляется распараллеливание счета по математическим областям в модели распределенной памяти с использованием интерфейса передачи сообщений MPI [4]. На втором уровне также с помощью MPI распараллеливается счет внутри математической области по параобластям. На третьем (нижнем) уровне осуществляется распараллеливание итераций счетных циклов в модели общей памяти с использованием интерфейса OpenMP [5]. Эти подходы могут применяться как вместе в различных сочетаниях, так и раздельно при расчете одной задачи.

Эффективное выполнение счетных программ на многопроцессорных машинах с распределенной памятью требует декомпозиции данных по процессам таким образом, чтобы распределение вычислительной нагрузки было равномерным, а количество межпроцессных обменов минимальным. При этом в процессе расчета сбалансированность вычислительной нагрузки со временем может ухудшаться. Проблема балансировки вычислительной нагрузки при проведении расчетов встречается во многих параллельных приложениях (см., например, [6—9]).

Балансировку вычислительной нагрузки для сеточных методик, использующих декомпозицию по пространству, можно классифицировать следующим образом:

- 1. Статическая балансировка. Выполняется на этапе начала расчета при построении декомпозиции с учетом весовых функций. Весовая функция отражает объем вычислений, необходимых для расчета элемента сетки. В методике ТИМ это время, которое требуется для расчета ячейки.
- Квазидинамическая балансировка. Заключается в построении полностью новой декомпозиции и переходе на нее без остановки счета. В методике ТИМ для квазидинамической балансировки применяются алгоритмы, аналогичные статической балансировке.
- Динамическая балансировка. Заключается в переносе расчета отдельных элементов сетки между вычислительными устройствами. В методике ТИМ такой перенос осуществляется по ячейкам и называется переброской.

В процессе численного моделирования работы различных конструкций по методике ТИМ количество ячеек не фиксировано, структура сетки может изменяться, выполняются различающиеся по объему вычислений процессы (алгоритмы поддержания качества счетной сетки, решение уравнений состояния веществ, кинетических уравнений — кинетики детонации, кинетики разрушения и т. д.). Поэтому, чтобы эффективно загрузить процессорное поле, выделенное на задачу, и ускорить счет, а также улучшить качество декомпозиции, необходима балансировка вычислительной нагрузки.

Алгоритмы декомпозиции со статической балансировкой не могут полностью обеспечить оптимального распределения вычислительной нагрузки по процессам. Это объясняется тем, что сами алгоритмы декомпозиции имеют определенную точность — обычно около 5%. Однако декомпозиция сначала делается для математических областей, затем для параобластей внутри области, и при этом каждый из этапов выполняется с точностью 5%. Негативный вклад в сбалансированность при статической балансировке связан и с тем, что используемая весовая функция является приближенной, так как получается усреднением времени для расчета по ячейкам. При декомпозиции со статической балансировкой также трудно учесть дополнительные ограничения (которые будут рассмотрены ниже), так как это требует решения полной оптимизационной задачи. В итоге разбалансированность может составлять до 10%.

В то же время опыт проведения расчетов показал, что основной проблемой является не получение плохой декомпозиции, а постепенное ухудшение ее свойств в процессе проведения расчета. Одним из путей решения данной проблемы является формирование и переход на новую декомпозицию (передекомпозиция). Однако, с одной стороны, выполнение передекомпозиции является дорогостоящей операцией, а, с другой, результирующая декомпозиция может не улучшить ситуацию при использовании сложных критериев для оценки ее качества. В таких случаях удобнее использовать локальное улучшение декомпозиции путем переброски ячеек между параобластями (динамическая балансировка вычислительной нагрузки). Эта операция может также использоваться для улучшения сбалансированности в процессе вычислений, когда еще не достигнута критическая ситуация для выполнения передекомпозиции данных.

#### Расчет весовой функции

Один из первых вопросов, который возникает при разработке алгоритмов балансировки, связан с определением весовой функции, отражающей вычислительную нагрузку. Для методики ТИМ использование априорных оценок для весовой функции затруднительно, так как целый ряд алгоритмов характеризуется изменяющейся вычислительной нагрузкой, причем отличие от шага к шагу может достигать нескольких раз. Поэтому весовая функция должна определяться динамически, непосредственно в процессе проведения расчета. Это делается исходя из времени выполнения разных счетных блоков на основании временных засечек. Другая проблема связана с изменяющимся в процессе счета количеством ячеек, которые непосредственно влияют на объем вычислений. К тому же некоторые алгоритмы распространяются не на одну конкретную ячейку, а на их набор — такая ситуация возникает, например, при решении систем линейных уравнений. Также важно заметить, что обращение к процедурам засечек времени является достаточно дорогостоящей операцией, поэтому чрезмерная детализация (например, определение времени расчета одного уравнения в одной конкретной ячейке) может приводить к существенному росту общего времени расчета.

В связи с этим при определении весовой функции в методике ТИМ должны выполняться следующие требования:

- определение на основе времени выполнения различных блоков;
- учет средневзвешенного объема вычислений за несколько шагов. При этом вклад за последние шаги должен быть значительно выше, чем за предыдущие 100 и более шагов;
- 3) привязка к ячейке сетки и области;
- учет алгоритмов, имеющих привязку не к одной, а к целому набору ячеек;
- 5) достаточно редкие обращения к процедурам получения временных засечек.

С учетом вышеизложенного в методике ТИМ принята следующая схема расчета весовой функции:

- 1. Вес области принимается равным суммарному весу ее ячеек.
- 2. При первоначальной декомпозиции, а также в других случаях, когда значение весовой функции становится неактуальным, вес ячейки принимается равным единице.
- Весовая функция для ячейки состоит из двух частей: w<sub>S</sub> — веса на текущем шаге и W<sub>c</sub> — общего веса.
- 4. Для определения  $w_S$  используется значение  $t_S$  время, необходимое для расчета данной ячейки на текущем шаге, которое определя-

ется следующим образом:  $t_S = \sum_{j=1}^{\infty} (T_j/N_j),$ 

$$\sum_{K} (T_s / N)$$

где K — количество счетных блоков, в которых участвует ячейка;  $T_j$  — время расчета блока j;  $N_j$  — количество ячеек, участвующих в расчете блока j.

5. В счетных блоках засечки времени могут не выполняться. В этом случае считается, что в расчете блока участвуют все ячейки с одинаковой нагрузкой. С другой стороны, допускается дополнительное "утяжеление" отдельных ячеек по каким-то другим законам (например, если ячейка участвует в расчете контактного взаимодействия). Для согласования времени счета области и ячеек в конце счетного шага производится расчет окончательного веса ячейки  $w_S$ :

$$w_{S} = \begin{cases} t_{S} \frac{T_{A}}{\sum_{i=1}^{K_{c}} (t_{S})_{c_{i}}}, & \text{если } \sum_{i=1}^{K_{c}} (t_{S})_{c_{i}} > T_{A}; \\ \sum_{i=1}^{L} (t_{S})_{c_{i}} \\ t_{S} + \frac{T_{A} - \sum_{i=1}^{K_{c}} (t_{S})_{c_{i}}}{K_{c}}, \\ & \text{если } \sum_{i=1}^{K_{c}} (t_{S})_{c_{i}} \le T_{A}, \end{cases}$$

где  $T_A$  — время расчета всей области;  $K_c$  — количество ячеек в области;  $(t_S)_{c_i}$  — время расчета (ненормированный вес) ячейки i на текущем шаге.

6. Общий вес ячейки пересчитывается в конце каждого счетного шага по формуле

$$W_c = \alpha W_c + w_S,$$

где  $\alpha < 1$  — некоторая константа, определяющая вклад за предыдущие шаги. Например, при  $\alpha = 0.955$  за 100 шагов вклад текущего  $w_S$  уменьшится примерно в 100 раз. Такая схема позволяет, с одной стороны, сгладить влияние конкретного шага, а с другой стороны, нивелирует влияние шагов, сделанных "давно".

7. При балансировке в качестве весовой функции ячеек используются значения  $W_c$ .

## Декомпозиция и статическая балансировка

При запуске расчета производится операция декомпозиции. Для методики ТИМ декомпозиция по пространству осуществляется в два этапа.

На первом этапе для каждой математической области определяется количество и размер параобластей. При этом решается модифицированная задача о минимизации времени обработки (minimum makespan problem [10]) с разделением заданий на подзадания разного веса. На данном этапе для балансировки используются веса математических областей. На втором этапе для каждой математической области формируется разбиение на параобласти (количество параобластей и их веса являются результатом первого этапа декомпозиции). Эта задача сводится к решению задачи о разрезании графа на подграфы. При формировании графа его вершины (точки) соответствуют ячейкам сетки, а ребра соседству между ячейками. В методике ТИМ ячейка является основным счетным элементом, поэтому декомпозиция для мелкозернистого распараллеливания строится по ячейкам.

Для решения задачи о разрезании графа на подграфы используются алгоритмы библиотек MeTiS [11] и SCOTCH [12]. Также реализован собственный алгоритм топологическогеометрической декомпозиции.

Статическая балансировка. Статическая балансировка является базовым алгоритмом, выполняющимся на этапе запуска задачи на счет. В процессе проведения расчета накапливается информация о времени, необходимом для расчета различных ячеек. Данная информация сохраняется вместе с контрольной точкой и используется в следующем запуске для определения весовой функции. Главным недостатком такого подхода является то, что он плохо согласуется с задачами, рассчитываемыми за небольшое количество запусков. Для таких задач приходится делать специальные запуски для накопления временных засечек. Также недостатком является то, что данный подход не позволяет сбалансировать вычислительную нагрузку в тех задачах, в которых она меняется значительно и довольно быстро в пределах одного запуска. Указанные недостатки ограничивают область применения данного подхода.

Топологическо-геометрическая декомпозиция. Топологическо-геометрическая декомпозиция основана на топологическом соседстве ячеек между собой. Помимо соседства ячеек сетки используется еще и геометрический критерий, ограничивающий попадание ячеек в параобласть при их наборе. Построение декомпозиции по топологическо-геометрическому алгоритму гарантирует односвязность параобластей и относительную гладкость границ.

Декомпозиция области проводится с учетом топологического соседства ячеек с использованием координат центров ячеек и узлов сетки таким образом, чтобы число ячеек в каждой параобласти было примерно одинаковым либо сбалансированным по вычислительной нагрузке.

Алгоритм разбиения области на параобласти строится следующим образом.

Зная количество ячеек сетки N, можно получить количество ячеек NPar в каждой параобласти  $p = \overline{1, nP}$ :

где m — остаток от деления N на nP.

Далее определяются  $X_{\min}$  и  $X_{\max}$ ,  $Y_{\min}$  и  $Y_{\max}$ ,  $Z_{\min}$  и  $Z_{\max}$  — глобальные минимумы и максимумы координат узлов сетки исходной области. Находится ближайший к вершине параллелепинеда узел ( $X_{\min}$ ,  $Y_{\max}$ ,  $Z_{\max}$ ) области. Этот узел становится начальным (опорным) в разбиении.

Далее определяются стартовая ячейка, одной из вершин которой является начальный (опорный) узел, и ее центр  $r_0$ . Также определяется ее максимальная диагональ (расстояние между самыми удаленными друг от друга вершинами ячейки). Вычисляется некоторый максимальный параметр  $\Delta R$  увеличения радиуса сферы, в пределах которой ячейки в параобласть будут набираться итерационно. Этот параметр выбран эмпирически и составляет 4—5 максимальных диагоналей стартовой ячейки.

Начиная от стартовой ячейки, по топологическому соседству производится набор ячеекпретендентов в параобласть, которые попадают в сферу радиусом  $R = \Delta Ri$ :  $|\vec{r}_k - \vec{r}_0| < R$ , где  $\vec{r}_k$  — центр k-й ячейки-претендента; i — номер итерации увеличения радиуса при наборе параобласти.

Если центр ячейки k находится в пределах заданной сферы, то для ячейки устанавливается признак принадлежности к параобласти p и счетчик количества ячеек K увеличивается на 1.

Если больше нет ячеек, попадающих в сферу радиусом R, а количество ячеек K < NPar(p), то выполняется переход к следующей итерации по увеличению радиуса сферы: i = i + 1. Количество итераций по увеличению радиуса для экономии времени ограничено пятью пустыми итерациями подряд. Под пустой итерацией понимается итерация, на которой не произошло добавления ячеек в рассматриваемую параобласть.

Завершается набор ячеек в параобласть p тогда, когда будет выполнено условие  $K \geq NPar(p)$  или выполнены все итерации по увеличению радиуса, включая пустые.

Данный подход к разбиению области на параобласти не обладает недостатками чисто геометрического подхода и является наиболее подходящим для декомпозиции данных по процессам в методике ТИМ.

Примеры применения различных алгоритмов декомпозиции. Примеры применения различных алгоритмов декомпозиции двумерной сетки на 100 параобластей при условии равного веса у всех ячеек представлены на рис. 1, *a*.

Примеры применения различных алгоритмов декомпозиции двумерной сетки на 100 параобластей при условии, что вес ячеек равен расстоянию от левого нижнего угла до центра ячейки, представлены на рис. 1, *б*.

Время выполнения декомпозиции с помощью библиотек SCOTCH и MeTiS и топологическо-



Рис. 1. Примеры декомпозиций двумерной сетки: a — равный вес у всех ячеек;  $\delta$  — вес ячейки равен расстоянию от центра до левого нижнего угла; слева — с помощью библиотеки SCOTCH; в центре — с помощью библиотеки MeTiS; справа топологическо-геометрическая декомпозиция

геометрической декомпозиции, а также коэффициент разбалансированности, полученный при запуске трехмерных задач на сетке в 10, 40 и 70 млн ячеек и декомпозиции на 100 компактов [3], представлены в табл. 1.

# Квазидинамическая балансировка вычислительной нагрузки

Квазидинамическая балансировка вычислительной нагрузки в методике ТИМ во многом является развитием подхода статической балансировки. В этом случае на счетном шаге оценивается текущая декомпозиция с точки зрения сбалансированности. Если текущая декомпозиция несбалансирована, то производится сохранение контрольной точки, полная очистка памяти, считывание сохраненных данных с построением новой декомпозиции. Такой подход не требует выполнения остановок, и благодаря этому решается ряд проблем, присущих статической балансировке. Например, для задач, где существенно меняется вычислительная нагрузка, передекомпозиция может быть сделана несколько раз за один запуск. Важным преимуществом данного подхода является возможность использования существующих алгоритмов сохранения контрольной точки, декомпозиции и инициализации параллельного счета. Также получение новой декомпозиции позволяет рассматривать всю задачу сразу, уходя от локальных операций.

Недостатком данного подхода является необходимость сохранения и чтения контрольной точки, а также построение новой декомпозиции. Эти операции для больших задач часто являются довольно дорогостоящими по времени и могут занимать существенную долю от времени выполнения расчета. По этой причине операция передекомпозиции должна выполняться достаточно редко, чтобы выигрыш в скорости счета превысил накладные расходы. В результате данный подход плохо применим для задач, где вычислительная нагрузка меняется интенсивно на значительном протяжении расчета.

Критерии квазидинамической балансировки вычислительной нагрузки. Образовывание струйных и вихревых течений, нарушение связности областей, изломы параобластей вблизи границы между параобластями (*параллельной границы*), происходящие в процессе численного моделирования конструкций в задаче, могут приводить к увеличению межпроцессных обменов. Алгоритмы квазидинамической балансировки используются для устранения указанных недостатков.

Для повышения технологичности проведения расчетов были разработаны и внедрены следующие критерии-анализаторы квазидинамической балансировки вычислительной нагрузки.

Таблица 1

#### Время выполнения декомпозиции

	Коэффициент разбалансированности, % —	Время выполнения декомпозиции		
Алгоритм		10 млн ячеек	40 млн ячеек	70млн ячеек
MeTiS	1,3	8,7	47	99
SCOTCH	0,99	27	137	282
Топологическо-				
геометрическая декомпозиция	$0,\!29$	78	274	417

1. Разбалансированность по вычислительной нагрузке. Данный критерий является классическим при расчетах двумерных и трехмерных задач. Если вычислительная нагрузка процесса больше средней загруженности по процессорам (разница более 30%), то выполняется квазидинамическая балансировка.

На рис. 2 приведен пример декомпозиции (при условии равного веса и равного размера у всех ячеек). Если каждая параобласть рассчитывается на своем процессе, то на процессе, рассчитывающем самую большую параобласть (слева), будет превышение средней вычислительной нагрузки.

2. Параобласть близка к перебитию. Перебитие параобласти приводит к нарушению ее связности. Если параобласть перебивается, то изменяется граф обменов между параобластями. Это требует специальных глобальных операций, снижающих производительность, как при непосредственном перебитии параобласти, так и при регулярном счете. По этой причине желательно не допускать такой ситуации.

На рис. З представлено сечение цилиндра, который врезается в преграду. Цилиндр и преграда принадлежат разным параобластям. В процессе внедрения цилиндра преграда становится тоньше. Если в месте пробития толщина преграды равна одной ячейке (см. рис. 3, a), то на следующем шаге произойдет перебитие параобласти, что приведет к появлению несвязных параобластей. Чтобы этого избежать, необходимо



Рис. 2. Пример декомпозиции, приводящей к разбалансированности по вычислительной нагрузке

выполнить передекомпозицию всей задачи (см. рис. 3,  $\delta$ ).

3. Неудовлетворительные геометрические свойства ячейки. Предполагается, что ситуация не может быть исправлена алгоритмами динамической балансировки (рис. 4).

Рассматриваются только ячейки, у которых параграничных (лежащих на границе параобластей) ребер больше, чем внутренних. Для того чтобы в результирующей декомпозиции уменьшить объем передаваемых данных, целесообразно выбирать ячейки с максимальной поверхностью раздела с соседней параобластью (в графе декомпозиции для соответствующей вершины количество разрезанных ребер больше, чем неразрезанных). Оценивается отношение количества параграничных ребер ячейки к количеству внутренних ребер. Если оно больше допустимого (заданного пользователем), то необ-



Рис. 3. Применение критерия "параобласть близка к перебитию": *a* — ситуация на шаге, предшествующем пробитию преграды цилиндром; *б* — декомпозиция после квазидинамической балансировки



Рис. 4. Длина внутренних ребер ячейки меньше, чем длина внешних ребер: *a* — до передекомпозиции; *б* — после передекомпозиции

ходимо выполнить квазидинамическую балансировку.

4. Ячейка содержит несколько особых точек. В этом случае также может требоваться изменение коммуникационного графа.

Особая точка — это узел сетки, в котором сходятся несколько границ между областями. В процессе численного моделирования по методике ТИМ может возникнуть ситуация, когда ячейка содержит несколько особых точек. В этих случаях необходима передекомпозиция всей задачи, чтобы избежать вырождения фрагмента границы, а значит, изменения коммуникационного графа задачи.

## Динамическая балансировка вычислительной нагрузки

Динамическая балансировка вычислительной нагрузки основана на переброске ячеек между соседними параобластями непосредственно при проведении расчета. К плюсам динамической балансировки относится то, что при ее выполнении не требуется останавливать задачу и выполнять дорогостоящую операцию сохранения и чтения контрольной точки, а также полную передекомпозицию задачи. Однако динамическая балансировка не лишена недостатков, ограничивающих ее применение.

В частности, довольно часто при разбалансированности вычислительной нагрузки наиболее и наименее загруженные параобласти не являются соседними. По смыслу динамической балансировки переброска ячеек в этом случае напрямую невозможна. Если же ее организовать, то это приведет к несвязности параобласти. Таким образом, возможны ситуации, когда динамическая балансировка не может напрямую решить проблему разбалансированности или потребуется множество операций переброски ячеек.

Другую проблему для динамической балансировки представляет ситуация, когда вычислительная нагрузка в процессе численного расчета меняется очень резко. Такая ситуация возможна, например, на старте задачи, когда первоначальная декомпозиция выполняется без использования весовых функций. В результате первоначальная декомпозиция может быть несбалансированной, вплоть до того, что некоторые MPIпроцессы должны полностью сменить набор ячеек. В этом случае объем передаваемых данных между параобластями чрезвычайно большой, и может оказаться, что быстрее выполнить передекомпозицию, т. е. квазидинамическую балансировку.

Определение операции переброски ячеек. Алгоритмы распараллеливания в методике ТИМ построены по ячейкам, и с ними связаны основные вычислительные затраты.

В результате декомпозиции каждая ячейка относится строго к одному компакту [3], на основе которого строится параобласть. Первоначальное распределение ячеек по компактам определяет номер параобласти, где соответствующая ячейка рассчитывается.

В процессе счета по какой-либо причине возможно изменение принадлежности ячейки параобласти. Из исходной параобласти ячейка удаляется, и функция ее расчета со всей необходимой информацией передается другой параобласти.

Отметим, что переброска ячеек возможна только между параобластями одной математической области, так как в разных математических областях сетки полностью не зависят друг от друга.

Бинарность операции переброски ячеек. Как видно из общего описания, операция переброски ячеек всегда бинарна, т. е. расчет ячейки передается из одной параобласти в другую. По этой причине на этапе переброски ячеек проще рассматривать бинарные алгоритмы, работающие с парой параобластей.

Очевидно, что переброска произвольных ячеек нецелесообразна. В частности, если выполнять переброску внутренних ячеек, то это приводит к ухудшению качества декомпозиции. Параобласть может стать несвязной с эффектом "оторванных" ячеек, может измениться схема взаимодействия между параобластями. Все это в конечном счете снижает эффективность распараллеливания.

Необходимо оптимально выполнять переброску ячеек между соседними параобластями, имеющими общую параллельную границу. Более того, перебрасывать нужно только ячейки, которые непосредственно примыкают к границе. Это упрощает саму операцию переброски и позволяет существенно повысить качество результирующей декомпозиции.

Результаты применения операции переброски ячеек за несколько шагов представлены на рис. 5.



Рис. 5. Применение опереции переброски ячеек: *а* — начальные декомпозиции; *б* — декомпозиции через несколько шагов; слева — двумерный случай; справа — трехмерный случай

Критерии динамической балансировки вычислительной нагрузки. Набор критериев для проведения динамической балансировки вычислительной нагрузки можно разделить на два класса:

- определение необходимости улучшения качества декомпозиции;
- 2) выбор ячеек для переброски.

Понятно, что данные критерии связаны между собой: критерии второго класса выполняются только в случае, если выполнен хотя бы один из критериев первого класса. Однако разделение критериев упрощает реализацию алгоритмов и согласование выполнения критериев между собой.

К критериям первого класса относятся:

- разбалансированность по вычислительной нагрузке;
- близость параобласти к перебитию.

К критериям второго класса относятся:

- неоптимальное отношение количества внутренних и граничных ребер (2D) или граней (3D);
- неоптимальное отношение длин внутренних и граничных ребер (2D) или площадей внутренних и граничных граней (3D);
- наличие ячейки с максимальным весом (на счет которой тратится максимальное количество времени);
- наличие ячейки неудовлетворительного качества для алгоритмов поддержания качества сетки.

Выбор критериев динамической балансировки вычислительной нагрузки позволяет улучшить качество декомпозиции, что приводит к эффективной загрузке процессорного поля, выделенного на задачу, и ускорению счета.

## Тестовые расчеты с использованием методов балансировки вычислительной нагрузки

Применение методов балансировки вычислительной нагрузки тестировалось на двумерных и трехмерных задачах.

Задача 1. Рассмотрим три тестовых расчета трехмерной задачи, содержащей две математические области, с искусственно заданной разбалансировкой: 14, 19 и 27%. Расчетная область состоит из 10050 ячеек. Задача считалась до момента времени 0,1 на 6 вычислительных узлах. В результате применения методов балансировки разбалансированность по вычислительной нагрузке в конце каждого расчета составила около 10%.

На рис. 6 показана начальная декомпозиция сетки. В табл. 2 приведено ускорение счета зада-



Рис. 6. Начальная декомпозиция сетки для задачи 1

чи при использовании методов балансировки вычислительной нагрузки. Небольшое ускорение счета задачи во втором и третьем тестах обусловлено большим объемом перебрасываемых ячеек. Расчет задачи 1 показывает действенность данных алгоритмов.

Задача 2. Применение методов балансировки вычислительной нагрузки тестировалось на модельной трехмерной задаче о плоской волне [13], содержащей 1 млн ячеек, при расчете на различном количестве вычислительных узлов. Для тестирования была использована шестигранная Задача считалась до момента времени сетка. t = 400 с использованием квазидинамической и динамической балансировок вычислительной нагрузки с различным набором критериев. Ускорение счета задачи и уменьшение разбалансированности по процессам на конечный момент времени, полученные при расчете с использованием методов балансировки вычислительной нагрузки на различном количестве узлов, представлены в табл. 3.

Как видно из результатов, в ряде случаев небольшое уменьшение разбалансированности приводит к более высокому росту скорости счета. Это объясняется тем, что в результате выполнения алгоритмов балансировки было потрачено меньше времени на вспомогательные алгоритмы.

Таблица 2

Ускорение счета задачи 1, полученное с использованием методов балансировки вычислительной нагрузки

Номер расчета	Разбалансированность по процессам, %	Время счета задачи		
		без методов балансировки	с использованием методов балансировки	e exopenne, 70
1	14	136,5	117,0	14
2	19	138	126	$^{8,7}$
3	27	140	127	9

Таблица 3

#### Ускорение счета задачи 2 и уменьшение разбалансированности по процессам

Коли-	Без методов балансировки		С использованием методов балансировки		Vменьшение	Veropenne
чество узлов	Дисбаланс, %	Время счета задачи	Дисбаланс, %	Время счета задачи	разбаланси- рованности по процессам, %	счета, %
10	16	76,953	7	70,791	9	8
20	17	59,854	11	$51,\!299$	6	14,3
30	22	51,036	19	47,384	3	$7,\!8$
50	24	50,112	21	$47,\!854$	3	$^{4,6}$
100	33	$55,\!838$	22	$55,\!648$	10	$0,\!3$

При расчете на 100 узлах выигрыш небольшой из-за того, что алгоритмы балансировки потребовали большого объема операций.

Задача 3. Были проведены тестовые расчеты трехмерной задачи, которая содержит пять математических областей, количество ячеек и параобластей в каждой из которых представлено в табл. 4. Сетка преимущественно шестигранная. Расчет задачи выполнен за 250 шагов с полным аппаратом поддержания качества сетки на 9 вычислительных узлах.

При решении данной задачи использовались критерии квазидинамической и динамической балансировок вычислительной нагрузки. При разбалансированности вычислительной нагрузки более 30% выполнялась передекомпозиция задачи, при разбалансированности больше 10% и менее 30% применялись алгоритмы выбора ячеек для переброски на основе следующих критериев: неоптимального отношения по количеству внутренних и внешних граней, неоптималь-

Количество ячеек по математическим областям в задаче 3

ного отношения по площади внутренних и внешних граней, наличия ячейки с максимальным весом, а также ряда критериев, используемых программами поддержания качества сетки. При расчете данной задачи была выполнена 1 квазидинамическая балансировка вычислительной нагрузки и переброшено около 900 ячеек в процессе динамической балансировки.

На рис. 7 приведен пример начальной декомпозиции задачи и результат квазидинамической балансировки вычислительной нагрузки.

В результате применения всех методов балансировки вычислительной нагрузки задача была рассчитана на 20 % быстрее.

Также были проведены расчеты 1000 шагов данной задачи на 10, 30 и 50 вычислительных узлах по 16 процессорных ядер в каждом с использованием полного аппарата поддержания качества сетки. Ускорение счета задачи с использованием методов балансировки вычислительной нагрузки на различном количестве узлов представлено в табл. 5.

Таблица 4

Номер математической области	Количество ячеек	Количество параобластей
1	132505	2
2	61392	3
3	157560	3
4	4648	Параобласти не создавались
5	533830	4



Рис. 7. Примеры декомпозиции для задачи 3: *a* — начальная; *б* — результат выполнения квазидинамической балансировки (передекомпозиция в процессе счета)
### Ускорение счета задачи 3

Количество вычис-	Время сче			
лительных узлов	с использованием алгоритмов балансировки	без использования алгоритмов балансировки	Jekopenne, 70	
10	18 392	20 076	8,3	
30	11168	12164	8	
50	8 119	9324	13	

### Заключение

Применение методов балансировки вычислительной нагрузки было продемонстрировано на расчете трехмерных многообластных задач.

Применение алгоритмов динамической и квазидинамической балансировок вычислительной нагрузки позволяет более эффективно загрузить процессорное поле, выделенное на задачу, и ускорить счет.

Таким образом, при расчете трехмерных задач получено ускорение до 14,3 %.

В дальнейшем планируется провести исследование на серии сложных расчетов для выбора набора параметров, оптимального для решения широкого класса прикладных задач.

## Список литературы

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

Sokolov S. S., Panov A. I., Voropinov A. A., Novikov I. G., Sobolev I. V., Yalozo V. V. Metodika rascheta trekhmernykh TIM sred zadach mekhaniki sploshnykh na nestrukturirovannykh mnogogrannykh lagranzhevykh setkakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2005.Vyp. 3. S. 37–52.

2. Соколов С. С., Воропинов А. А., Новиков И. Г., Панов А. И., Соболев И. В., Пушкарев А. А. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Там же. 2006. Вып. 4. С. 29—43.

Sokolov S. S., Voropinov A. A., Novikov I. G., Panov A. I., Sobolev I. V., Pushkarev A. A. Metodika TIM-2D dlya rascheta zadach mekhaniki sploshnoy sredy na neregulyarnykh mnogougolnykh setkakh c proizvilnym kolichestvom svyazey v uzlakh // Tam zhe. 2006. Vyp. 4. S. 29–43.

- Воропинов А. А., Соколов С. С. Метод трехуровневого распараллеливания методики ТИМ-2D // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 4. С. 70—77. Voropinov A. A, Sokolov S. S. Metod trekhurovnevogo rasparallelivaniya metodoki TIM-2D // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2013. Vyp. 4. S. 70—77.
- 4. MPI Documents. http://www.mpi-forum.org/ docs/docs.html.
- 5. OpenMP Specifications. http://www.openmp. org/drupal/node/view/8.
- 6. Якобовский М. В. Введение в параллельные методы решения задач. Глава 8. Динамическая балансировка загрузки процессоров. М.: Изд-во Московского ун-та, 2013. C. 223-277. Yakobovskių M. V. VVedenie v parallelnye metody resheniya zadach. Glava 8. zagruzki Dinamicheskava balansirovka protsessorov. Izd-vo Moskovskogo M.: un-ta, 2013. S. 223-277.
- Копысов С. П., Новиков А. К., Рычков В. Н. Уровни и алгоритмы динамической балансировки вычислительной нагрузки // Сб. трудов XII Всероссийской школы-семинара

"Современные проблемы математического моделирования". Абрау-Дюрсо: Изд-во Южного федерал. ун-та, 2006. С. 136—165. *Kopysov S. P., Novikov A. K., Rychkov V. N.* Urovni i algoritmy dinamicheskoy balansirovki vychislitelnoy nagruzki // Sb. trudov XII Vserossiyskoy shkoly–seminara "Sovremennyye problem matematicheskogo modelirovaniya". Abrau-Dyurso: Izd-vo Yuzhnogo federal. unta, 2006. S. 136—165.

- 8. Беляев С. П., Дегтяренко Л. И., Турутина И. Ю. Проблемы и возможности разработки параллельных программ с динамической балансировкой вычислительной нагрузки для решения задач механики сплошной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1996. Вып. 4. С. 43-44. Belyaev S. P., Degtyarenko L. I., Turutina I. Yu. Problemy i vozmozhnosti razrabotki parallelnykh programm s dinamicheskoy balansirovkoy vychislitelnoy nagruzki dlya resheniya zadach mekhaniki sploshnoy sredy // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1996. Vyp. 4. S. 43-44.
- 9. Волков К. Н. Балансировка нагрузки процессоров при решении краевых задач механики жидкости и газа сеточными методами // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13. С. 107—129. K. N. Volkov Balansirovka nagruzki protsessorov pri reshenii kraevykh zadach zhidkosti i gaza setochnymy mekhaniki metodamy Vychislitelnye metody// programmirovanie. 2012. T. 13. S. 107–129.

- A Polynomial Time Approximation Scheme for Minimum Makespan. http://www.cs.ust.hk/ mjg\_lib/Classes/COMP572\_Fall07/Notes/ Min\_Makespan.pdf
- Karypis G., Kumar V. METIS: A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices. Version 4.0. Technical report. Univ. of Minnesota, Dept. of Computer Sci. and Eng., 1998.
- Pellegrini F., Roman J. SCOTCH: A Software Package for Static Mapping by Dual Recursive Bipartitioning of Process and Aarchitecture Graphs. HPCN-Europe, Springer LNCS 1067, 1996. P. 493–498.
- 13. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И., Зубов Е. Н., Ковалёв Н. П., Соколов С. С., Шемарулин В. Е. Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 3—14.

Bondarenko Yu. A., Voronin B. L., Delov V. I., Zubov E. N., Kovalev N. P., Sokolov S. S., Shemarulin V. E. Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoye modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1991. Vyp. 2. S. 3–14.

Статья поступила в редакцию 22.02.19.

COMPUTATIONAL LOAD BALANCING METHODS IN "TIM" CODE / S. S. Sokolov, I. G. Novikov, A. A. Voropinov, T. N. Polovnikova (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region).

The paper describes the computational load balancing methods implemented in the TIM code. The set of criteria used for the dynamic and quasi-dynamic balancing is described. The dynamic balancing consists in transferring the calculation of cells from one process to another, the quasi-dynamic balancing consists in completely re-initializing the problem data with no interrupts of the computing process and constructing a new decomposition. Fields of application are considered for the dynamic and quasi-dynamic balancing algorithms.

The use of the computational load balancing methods allows efficiently loading the field of processors allocated to solve the problem and speeding up the computational process.

*Keywords*: the TIM code, decomposition, dynamic balancing, quasi-dynamic balancing, criteria for the decomposition quality estimation.

# МОДЕЛИ НАСЫЩЕННО-НЕНАСЫЩЕННОЙ И НАПОРНО-БЕЗНАПОРНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В КОМПЛЕКСЕ ПРОГРАММ "НИМФА"

# А. Н. Бахаев, П. А. Машенькин, М. Л. Сидоров (ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлено описание моделей насыщенно-ненасыщенной и напорно-безнапорной изотермической фильтрации жидкости в пористых средах. Приведены основные уравнения моделируемых процессов, а также используемые сетки. Показано качественное и количественное согласие результатов на задачах с аналитическими решениями и задачах, рассчитанных по коммерческой программе FEFLOW.

*Ключевые слова:* программный комплекс НИМФА, насыщенно-ненасыщенная фильтрация, напорно-безнапорная фильтрация, верификация, кросс-верификация.

### Введение

За последние десятилетия в связи с интенсивным воздействием человека на гидросферу произошло существенное нарушение естественного гидродинамического и гидротехнического режимов подземных вод — одного из важнейших компонентов окружающей среды. Мелиорация, добыча полезных ископаемых, откачка воды из водоносных горизонтов, создание новых плотин на реках, изменение уровня воды в существующих водохранилищах и целый ряд других факторов приводят к масштабному изменению состояния почвы и подземных вод.

В связи с этим возникает необходимость при выполнении различных мероприятий оценивать последствия такого воздействия. При этом натурные наблюдения и целенаправленные эксперименты, выполняемые для оценки антропогенного влияния, оказываются весьма дорогостоящими и трудновыполнимыми. Поэтому актуальным становится использование теоретических подходов численных расчетов с применением математических моделей рассматриваемых процессов.

Программный комплекс (ПК) НИМФА [1] создан в РФЯЦ-ВНИИЭФ в ходе реализации проекта "Развитие суперкомпьютеров и грид-технологий", принятого Комиссией при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики России в 2010—2012 годах.

ПК НИМФА предназначен для моделирования многокомпонентной многофазной фильтрации и переноса примесей подземными водами в подземном пространстве со сложной геологической структурой. Программа ориентирована на решение задач с помощью полномасштабного комплексного моделирования на современных высокопараллельных суперЭВМ (десятки тысяч процессоров).

В ПК НИМФА для расчета гидродинамики подземных вод была реализована модель напорной фильтрации [1] (все поры породы заполнены водой). Однако на практике большой класс течений подземных вод (образование депрессионных воронок вблизи карьеров и откачивающих скважин, сезонные изменения уровня грунтовых вод и т. д.) плохо описывается этой моделью. Для расчета таких течений используются две модели — насыщенно-ненасыщенной и напорно-безнапорной фильтрации.

Модель насыщенно-ненасыщенной фильтрации используют, когда рассматривается зона, в которой часть пор заполнена водой, а часть — воздухом.

Модель напорно-безнапорной фильтрации представляет собой упрощение модели насыщенноненасыщенной фильтрации: зоны с водой и воздухом нет, а между сухой и мокрой зонами существует четкая граница.

### Математические модели фильтрации

Насыщенно-ненасыщенная фильтрация. Математическая модель насыщенно-ненасыщенной фильтрации жидкости в пористой среде описывается уравнением Ричардса [2]

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \left[ \frac{\theta\left(\psi\right)}{m} \rho g\left(m\alpha + \beta\right) + \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right] = \operatorname{div}\left(\rho \frac{Kk_r(\psi)}{\mu} \nabla\left(\psi + z\right)\right) + Q.$$
(1)

Здесь  $\rho$  [кг/м<sup>3</sup>] — плотность жидкости; g [м/сут<sup>2</sup>] — ускорение свободного падения;  $\psi = P/\rho g$  [м] — высота всасывания, где P [бар] — давление;  $\theta$  — влагосодержание; m — пористость;  $\alpha$  — сжимаемость жидкости;  $\beta$  — сжимаемость породы; K [м/сут] — коэффициент фильтрации;  $k_r(\psi)$  — относительная проницаемость;  $\mu$  —динамическая вязкость жидкости; z [м] — вертикальная координата; Q [кг/сут] — массовые источники и стоки.

В случае, когда пористая среда и вода — несжимаемые, уравнение (1) будет иметь вид

$$\frac{\partial \theta\left(\psi\right)}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\frac{Kk_{r}(\psi)}{\mu}\nabla\left(\psi+z\right)\right) + Q.$$

Для численного решения уравнения (1) необходимы замыкающие соотношения (модели водоудерживающей способности почвы). Для этого используют алгебраические уравнения связи высоты всасывания  $\psi$  с влагосодержанием  $\theta$ , называемые капиллярными соотношениями. Также нужны соотношения, связывающие коэффициент фильтрации  $K(\psi)$  и высоту всасывания  $\psi$ .

В ПК НИМФА были реализованы следующие модели зависимостей  $\theta(\psi)$  и  $K(\psi)$  (данные модели используются, например, в HYDRUS [3]):

- Брукса—Кори (Brooks and Corey);
- ван Генухтена-Муалема (van Genuchten-Mualem);
- Вогела-Цислерова (Vogel and Cislerova);
- Косуги (Kosugi);
- Гарднера—Рийтема (Gardner and Rijtema).

Для примера приведем одну из самых широко используемых моделей ван Генухтена-Муалема:

$$\theta\left(\psi\right) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left(1 + |\alpha\psi|^n\right)^m}, & \psi < 0; \\ \theta_s, & \psi \ge 0; \end{cases}$$
$$K\left(\psi\right) = K_s S_{e,s}^l \left[1 - \left(1 - S_{e,s}^{1/m}\right)^m\right]^2, \quad S_{e,s} = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

где  $S_{e,s}$  — эффективная насыщенность; m = 1 - 1/n, n > 1;  $\theta_r$  и  $\theta_s$  — остаточное (т. е. не извлекаемое гравитационным путем) влагосодержание и влагосодержание при полном насыщении соответственно;  $K_s$  [м/сут] — коэффициент фильтрации в условиях насыщения;  $\alpha$  [м<sup>-1</sup>] — параметр модели, функция размера пор; n — коэффициент распределения размеров пор; l — параметр связности пор.

Напорно-безнапорная фильтрация. Модель напорно-безнапорной фильтрации является частным случаем модели насыщенно-ненасыщенной фильтрации. В FEFLOW [2] подобная модель называется моделью фильтрации в пористой среде со свободной поверхностью с псевдоненасыщенными условиями.

Вводится в рассмотрение величина псевдонасыщенности  $S^e_p$ , которая определяется по следующей формуле:

$$S_{p}^{e} = S_{p}^{e}\left(\psi\right) = \frac{\Omega^{e,f}\left(\psi\right)}{\Omega^{e}},$$

где  $\Omega^{e}(\psi)$  [м<sup>3</sup>] — объем ячейки (индекс *e* обозначает принадлежность ячейке);  $\Omega^{e,f}(\psi)$  [м<sup>3</sup>] — объем жидкости в ячейке (индекс f означает заполнение флюидом).

Возможны три состояния насыщенности ячейки е (на рис. 1 ячейка выделена красным контуром, столб жидкости показан голубым цветом):

- полностью насыщенная, если в ней  $\psi \ge 0$ . Тогда  $\Omega^{e,f} = \Omega^e$  и  $S_p^e \equiv 1$ ; частично насыщенная, если  $-h^e < \psi < 0$ , где  $h^e$  высота ячейки;
- полностью ненасыщенная (сухая), если  $\psi < -h^e$ .

Практически есть возможность задать минимальную толщину жидкости в ячейке (minimum filling height)  $h_r^e = 1$  мм (см. рис. 1, e) как предел при  $\Omega^{e,f} \to \Omega_r^{e,f}$ . То есть  $h_r^e$  — это высота водного столба в ячейке, которая соответствует минимальной влагонасыщенности. Величина  $h_r^e$  используется для того, чтобы вычислить остаточную насыщенность  $S_{p,r}^e = \Omega_r^{e,f} / \Omega^e > 0.$ 

Функция насыщенности определяется следующим образом:

$$S_{p}^{e} = \begin{cases} 1, & \psi \ge 0; \\ 1 + \frac{(1 - S_{p,r}^{e})\psi}{h^{e}}, & -h^{e} < \psi < 0; \\ S_{p,r}^{e}, & \psi \le -h^{e}, \end{cases}$$

где  $h^e$  [м] — высота ячейки;  $\psi$  [м] — высота всасывания.

Зависимость высоты всасывания  $\psi$  от насыщенности  $S_p^e$  приведена на рис. 2.

Таким образом, влагосодержание в ячейке определяется по следующей формуле:

$$\theta = \begin{cases} m, & \psi \ge 0; \\ m \left[ 1 + \frac{(1 - S_{p,r}^e)\psi}{h^e} \right], & -h^e < \psi < 0; \\ m S_{p,r}^e, & \psi \le -h^e. \end{cases}$$

Предположения, касающиеся коэффициента фильтрации, следующие:



Рис. 1. Три варианта насыщенности  $S_p^e$ : *a* — насыщенная ячейка; *б* — частично насыщенная; *в* — полностью ненасыщенная (сухая) ячейка

<sup>\*</sup>Всюду далее будем использовать термин насыщенность.



Рис. 2. Линейная зависимость между высотой всасывания  $\psi$  и насыщенностью  $S_p^e$  для ячейки e высотой  $h^e$ 

- в ненасыщенной зоне он является малой величиной по отношению к насыщенной зоне (его значение задается пользователем);
- для заданной ячейки коэффициент фильтрации меняется линейно от минимального значения (влагосодержание близко к нулю) до максимального (полное заполнение водой ячейки) по мере роста уровня грунтовых вод.

Коэффициент фильтрации определяется следующим образом:

$$K\left(\psi\right) = K_r(\psi)K_s.$$

Здесь относительная проницаемость задается выражением

$$K_r(\psi) = \begin{cases} 1, & \psi \ge 0;\\ \max(S, K_r^{\min}), & \psi < 0, \end{cases}$$

где  $K_r^{\min}$  — минимальное значение относительной проницаемости среды, используется как параметр модели.

Таким образом, описанная модель напорно-безнапорной фильтрации имеет два параметра, которые могут быть заданы пользователем:  $h_r$  и  $K_r^{\min}$ .

### Начальные и граничные условия

В качестве начальных условий могут задаваться распределение высоты всасывания в пористой среде

$$\psi\left(x, y, z, 0\right) = \psi_0\left(x, y, z\right)$$

и (или) распределение гидростатического напора

$$H(x, y, z, 0) = H_0(x, y, z).$$

Могут быть заданы граничные условия, зависящие от координат и времени:

первого рода — типа Дирихле. Данное граничное условие определяет напор на участке границы Γ расчетной области:

$$\psi(x, y, z, t)|_{\Gamma} = \psi_{\Gamma}(x, y, z, t);$$

2) второго рода — Неймана. Данное условие позволяет задать поток жидкости  $\vec{q_{\Gamma}}$  через границу  $\Gamma$ :

$$V(x, y, z, t) \times \vec{n}|_{\Gamma} = \vec{q}_{\Gamma}(x, y, z, t),$$

где  $\vec{V}$  — скорость жидкости.

3) третьего рода — линейная комбинация условий первого и второго рода.

Граничные условия могут задаваться на частях граничной поверхности области моделирования (кровля, подошва, боковая поверхность). По умолчанию на всех границах и для всех моделируемых процессов задано условие второго рода — производная по нормали от величины равна нулю (т. е. для процесса фильтрации  $\frac{\partial H}{\partial n} = 0$ ).

## Дискретизация уравнений

Расчетная методика решения нестационарных и стационарных задач изотермической насыщенноненасыщенной и напорно-безнапорной фильтрации в пористом пласте построена на основе метода конечного объема, неструктурированной сетки и записи неявных аппроксимаций в дельта-форме. Линеаризация системы конечно-объемных уравнений производится относительно приращения давления. Система линейных алгебраических уравнений решается в параллельном режиме методами, реализованными в библиотеке LParSol [4], разработанной в РФЯЦ-ВНИИЭФ. Сходимость итераций обеспечивается автоматическим выбором шага по времени. В общем случае решаются трехмерные задачи. В частном случае можно решать двумерные задачи в плоскости (x, y) и вертикальном разрезе (x, z). Переписываем уравнение (1), используя следующие формулы:

$$\frac{\partial(\psi+z)}{\partial t} = \frac{\partial(\psi)}{\partial t}; \quad \psi = \frac{P}{\rho g}; \quad S_0 = \beta + \frac{\alpha}{m}; \quad K = \rho \frac{KK_r(\psi)}{\mu}.$$

В результате имеем

$$S_0 \theta \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} = \operatorname{div} \left( K \left( \nabla P - \rho \vec{g} \right) \right) + Q.$$
<sup>(2)</sup>

Интегрируем уравнение (2) по объему ячейки  $\Delta V_k$ , ограниченной поверхностью  $\Sigma_k = \bigcap_{f=1}^F \Delta S_f$ , и, используя формулу Гаусса—Остроградского, записываем интегральный закон уравнения фильтрации:

$$\int_{\Delta V_k} \left( S_0 \theta \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) dV = \int_{\Sigma_k} \left[ K \left( \nabla P - \rho \vec{g} \right) \right] \vec{n} dS + \int_{\Delta V_k} Q dV.$$
(3)

Далее, используя квадратурные формулы, заменяем интегральные выражения разностными. При интегрировании будем использовать теорему о среднем. В качестве среднего значения функции по объему примем ее значение в центре ячейки, а в качестве среднего значения функции на грани ее значение в центре грани. Тогда уравнение (3) в полудискретном виде запишется так:

$$\left(S_0\theta\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t}\right)_k \Delta V_k = \sum_{f=1}^F \left[K\left(\nabla P - \rho \vec{g}\right)\vec{n}\right]_f \Delta S_f + (Q\Delta V)_k.$$
(4)

Запишем дискретизацию производной влагосодержания по времени  $\frac{\partial \theta}{\partial t}$  и производной давления по времени  $\frac{\partial P}{\partial t}$  в уравнении (4) по схеме первого порядка аппроксимации:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{\theta^{n+1} - \theta^n}{\tau^n}; \quad \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{P^{n+1} - P^n}{\tau^n},\tag{5}$$

где *n* — шаг по времени.

Подставляя выражения для производных (5) в (4) и аппроксимируя разностный оператор по верхнему временному слою, получаем следующую неявную схему:

$$\left(S_0\theta \frac{P^{n+1} - P^n}{\tau^n} + \frac{\theta^{n+1} - \theta^n}{\tau^n}\right)_k \Delta V_k = \sum_{f=1}^F \left[K\left(\nabla P - \rho \vec{g}\right)\vec{n}\right]_f \Delta S_f + (Q\Delta V)_k.$$
(6)

Введем следующее обозначение:

$$\Lambda(P) = \sum_{f=1}^{N_f} \left[ K \left( \nabla P - \rho \vec{g} \right) \right]_f \vec{n}_f \Delta S_f.$$
(7)

Будем искать решение на новом временном слое по неявной схеме методом итераций. Тогда разностное уравнение (6) с учетом обозначения (7) примет вид

$$\left(S_0\theta \frac{P^{\gamma+1} - P^n}{\tau^n} + \frac{\theta^{\gamma+1} - \theta^n}{\tau^n}\right)_k \Delta V_k = \Lambda(P^{\gamma+1}) + (Q\Delta V)_k$$

где  $\gamma$  — номер итерации.

Значения  $\theta^{\gamma+1}$  и пространственного оператора  $\Lambda(P^{\gamma+1})$  определяются с помощью линеаризации по Ньютону:

$$\theta^{\gamma+1} = \theta^{\gamma} + \left(\frac{\partial\theta}{\partial P}\right)^{\gamma} \Delta P; \quad \Lambda(P^{\gamma+1}) = \Lambda(P^{\gamma}) + \left(\frac{\partial\Lambda}{\partial P}\right)^{\gamma} \Delta P; \quad \Delta P = P^{\gamma+1} - P^{\gamma}. \tag{8}$$

Рассмотрим слагаемое  $\left(\frac{\partial\Lambda}{\partial P}\right)^{\gamma}\Delta P$ из второй формулы (8):

$$\left(\frac{\partial\Lambda}{\partial P}\right)^{\gamma}\Delta P = \Lambda(P^{\gamma+1}) - \Lambda(P^{\gamma}) = \\ = \left\{\sum_{f=1}^{N_f} \left[K\left(\nabla P - \rho\vec{g}\right)\right]_f \vec{n}_f \Delta S_f\right\}^{\gamma+1} - \left\{\sum_{f=1}^{N_f} \left[K\left(\nabla P - \rho\vec{g}\right)\right]_f \vec{n}_f \Delta S_f\right\}^{\gamma}.$$

Взяв нелинейные коэффициенты с предыдущего слоя, получим:

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial P}\right)^{\gamma} \Delta P = \sum_{f=1}^{N_f} \left[K^{\gamma} \left(\operatorname{grad} \Delta P\right)\right]_f \vec{n}_f \Delta S_f.$$

Таким образом, разностная схема имеет вид

$$\frac{\Delta V_k}{\tau^n} \left[ \left( \frac{\partial \theta}{\partial P} \right)^{\gamma} + S_0 \theta^{\gamma} \right] \Delta P - \left( \frac{\partial \Lambda}{\partial P} \right)^{\gamma} \Delta P = \frac{\theta^n - \theta^{\gamma}}{\tau^n} \Delta V_k + \Lambda (P^{\gamma}) + (Q \Delta V)_k + S_0 \theta^{\gamma} \frac{P^{\gamma} - P^n}{\tau^n} \Delta V_k,$$

где  $(Q\Delta V)_k$  [кг/м<sup>3</sup>] — приток массы флюида в ячейку за единицу времени. Это так называемая дельта-форма разностного уравнения, где искомое решение является приращением давления в ячейках разностной сетки, а правая часть разностного уравнения является невязкой, т. е. погрешностью разностной аппроксимации уравнения фильтрации.

При определении потоков через грани ячеек в схеме (6) используется метод отложенной коррекции [1]. Относительная проницаемость  $K_r$  для общей грани двух ячеек определяется противопоточным методом, т. е.  $K_r$  берется из той ячейки, где больше гидростатический напор. Такой способ выбора  $K_r$  необходим для уменьшения осцилляций решения.

### Верификация моделей фильтрации в ПК НИМФА

При разработке расчетного кода этапом, предваряющим применение кода на практике, является верификация численной модели. Верификация заключается в сравнении результата, полученного по этой модели, с известными референтными решениями (аналитическими, численными или полученными экспериментальным путем). Для тестирования моделей насыщенно-ненасыщенной и напорно-безнапорной фильтрации в ПК НИМФА использовались тестовые задачи, имеющие аналитического решения, но численно исследованные ранее с помощью некоторых комплексов программ. В качестве матрицы верификации использовался набор из 10 тестов.

Сравнение результатов для тестов с аналитическим решением проводилось с помощью относительной погрешности L<sub>1</sub>, рассчитываемой по формуле

$$L_1 = \frac{\sum_i \left| f_i^{analit} - f_i^{calc} \right|}{\sum_i \left| f_i^{analit} \right|} \cdot 100\%,$$

где суммирование выполняется по всем ячейкам области.

Расчеты задач из матрицы верификации показывают, что погрешность численного решения в задачах с аналитическим решением в основном не превышает 2,2%.

Для задач, не имеющих аналитического решения, сравнение проводилось с результатами расчетов этих задач, полученными по другим программным комплексам.

Приведем результаты некоторых тестов.

Одномерная нестационарная ненасыщенная фильтрация в вертикальном столбе сухого грунта. Описание теста приведено в [5]. Данная задача не имеет аналитического решения и решается численно. Необходимо получить профиль высоты всасывания от вертикальной координаты  $\psi(z,t)$  в момент времени t = 1 сут и сравнить его с результатами, полученными по FEFLOW [2].

В задаче используется модель ван Генухтена-Муалема [2] с параметрами, приведенными в [5]. Задача решалась на регулярной сетке с шагами по пространству  $\Delta z = 0.5$ ; 2,5 см. Количество ячеек составило 200 и 40 соответственно. Шаг по времени выбирался автоматически.



Рис. 3. Профили  $\psi$  в расчетах ПК НИМ-ΦA FEFLOW грубой подроб-И для И 2,5 см, НИМФА;  $\Delta z$ ной сеток: =  $\dots - \Delta z = 0.5 \,\mathrm{см}, \,\mathrm{HИМ}\Phi\mathrm{A}; \,-\!\!-\Delta z = 0.5 \,\mathrm{см},$ FEFLOW; —  $-\Delta z = 2.5 \,\mathrm{cm}$ , FEFLOW

На рис. 3 показаны профили высоты всасывания  $\psi$  на момент времени t = 1 сут для разных шагов сетки в сравнении с профилями, полученными по FEFLOW. Из рисунка видно их хорошее качественное согласие. Относительная погрешность  $L_1$  между численными решениями FEFLOW и ПК НИМФА составила не более 0,27%. Время счета задачи на сетке в 200 ячеек равно 0,73 с.

Задача о капиллярном барьере. Капиллярные барьеры образуются в ненасыщенных условиях, когда слой мелкозернистых пород лежит на слое крупнозернистых отложений. Барьер возникает из-за разной проницаемости мелкозернистых и крупнозернистых пород в ненасыщенных условиях.

В расчетной области присутствуют два наклонных пласта толщиной 0,5 м каждый. Верхний пласт состоит из мелкозернистых, а нижний — из крупнозернистых песков. Угол наклона капиллярного барьера составляет 5%. Полная постановка теста приведена в [2].

Данная задача позволяет рассмотреть следующие вопросы:

- орошение сильно осушенных грунтов, что обычно вызывает большие трудности с вычислительной точки зрения;
- сильная неоднородность гидравлических параметров пластов;
- образование насыщенной зоны внутри расчетной области.



Рис. 4. Сетка со сгущением к поверхности раздела пластов

Аналитическое решение для данной задачи получается по формуле Росса [6], которая дает выражение отклонения потока капиллярным барьером. При тестировании необходимо сравнить расчетное отклонение потока с аналитическим решением и провести кросс-верификацию с программой FEFLOW [2].

При моделировании задачи о капиллярном барьере в ПК НИМФА использовалась гексаэдральная расчетная сетка, содержащая 1 600 ячеек (рис. 4). Была использована сетка с измельчением к поверхности раздела пластов. При построении сетки в ПК НИМФА расчетная область была разделена на 4 пласта: верхний и нижний толщиной 0,45 м и два средних толщиной 0,05 м. Для дискретизации каждого из этих пластов используется одинаковое количество сеточных слоев по вертикали. Параметры сетки следующие: шаг по оси X - 2 м; шаг по оси Z во втором и третьем слоях — 0,00625 м, в первом и четвертом слоях — 0,05625 м. На рис. 5 показаны результаты расчета насыщенности по ПК НИМФА и по программе FEFLOW, демонстрирующие близкое совпадение структуры насыщенности в расчетной области.

На рис. 6 показаны рассчитанные отношения потока (просачивания) через барьер (поверхность раздела мелкозернистой и крупнозернистой пород) к инфильтрации в сравнении с аналитической формулой Росса. Можно констатировать качественное соответствие результатов аналитическому решению и количественное — результатам, полученным с помощью программы FEFLOW [3]. При этом решение по ПК НИМФА проявляет монотонный характер, в то время как в решении FEFLOW наблюдаются осцилляции. Время счета задачи на сетке в 1 600 ячеек составило 26,2 с.



Рис. 5. Насыщенность, рассчитанная с помощью программы FEFLOW (a) и ПК НИМФА (б)



Рис. 6. Отношение просачивания через барьер к инфильтрации: – – по формуле Росса; ····· – по ПК НИМФА; — по программе FEFLOW

Задача Полубариновой-Кочиной о безнапорной фильтрации через тело дамбы. Постановка задачи приведена в [7]. Исследуется двумерная стационарная фильтрация через тело дамбы (прямоугольную перемычку). Необходимо получить сопоставление расходов жидкости, протекающей через перемычку, посчитанных с применением численной модели и аналитически, а также сопоставление расчетных и аналитических высот участков высачивания в нижнем бьефе перемычки. Постановка задачи схематично приведена на рис. 7.

Использовалась последовательность сеток в 10, 20 и 40 ячеек по осям X и Z, по оси Y задавалась одна ячейка (ширина дамбы размером 0,25 м). Данная задача является стационарной. В ПК НИМФА она рассчитывалась методом установления.

Полученные результаты приведены в таблице, где Q — расход через перемычку; погрешность определяется по формуле  $\frac{|Q_a - Q_n|}{Q_a} \cdot 100 \% (Q_a$  — расход, полученный аналитически;  $Q_n$  — расход, полученный численно). Из таблицы следует сходимость численных результатов к аналитическому значению. Максимальная погрешность (на самой грубой сетке  $10 \times 10$ ) по расходу жидкости через перемычку составляет 0,88 %, а на сетке  $40 \times 40 - 0,33 \%$ .

На рис. 8 показано распределение насыщенности в перемычке. Размер участка высачивания при данных граничных условиях в соответствии с [7] равен 2 м. Размер участка высачивания, полученный численно с помощью ПК НИМФА, равен 2,5 м. Время счета задачи на сетке из 1600 ячеек составило 0,86 с.



Рис. 7. Постановка задачи Полубариновой-Кочиной



Рис. 8. Задача Полубариновой-Кочиной. Распределение насыщенности в перемычке, полученное с помощью ПК НИМФА

## Задача Полубариновой-Кочиной. Сопоставление численных и аналитических расходов жидкости через перемычку

Расчет	$Q$ , м $^3$ /сут	Погрешность, %	
Аналитический	1,0368	—	
Численный, сетка $10 \times 10$	1,04596	0,88	
Численный, сетка $20 \times 20$	1,04267	0,559	
Численный, сетка 40 $\times$ 40	1,04025	0,33	

Задача Баренблатта о растекании бугра в безнапорном сухом пласте. Рассматривается двумерное движение подземных вод в области фильтрации, лежащей на горизонтальном водоупоре. Необходимо сравнить результаты с аналитическим решением. Описание теста приведено в [8]. Постановка задачи представлена на рис. 9. Аналитическое решение данной задачи получено Г. И. Баренблаттом [8].

Для решения задачи была использована регулярная сетка с шагом по пространству 1 м. Количество ячеек в расчете составляет 20000. Сравнение аналитических решений с численными результатами (рис. 10) дает хорошее совпадение. Относительная погрешность численного и аналитического решений не превысила 2,04%. Время счета задачи на сетке из 2000 ячеек при расчетном времени  $t = 1\,000$  сут составило 45 с.



Рис. 9. Схема области задачи Баренблатта



Рис. 10. Аналитическое решение задачи Баренблатта (——) и численное решение, полученное с помощью ПК НИМФА (– – –),  $t=1\,000\,{\rm cyr}$ 

#### Заключение

На данный момент в РФЯЦ-ВНИИЭФ в комплексе программ НИМФА реализованы модели насыщенно-ненасыщенной и напорно-безнапорной фильтрации. Приведены результаты численных расчетов ряда тестовых задач с использованием этих моделей. При этом в качестве тестовых использованы задачи с известными аналитическими решениями.

Представлены результаты сравнения аналитических решений с численными, полученными как по пакету НИМФА, так и по коммерческой программе FEFLOW, применяемой для решения данного класса задач.

В результате выполненной работы показано, что реализованная в ПК НИМФА модель насыщенноненасыщенной фильтрации хорошо описывает все особенности решений. Также показано, что результаты, полученные по программе FEFLOW и по пакету НИМФА, очень близки.

## Список литературы

1. Бутнев О. И., Пронин В А., Сидоров М. Л., Колесников С. С., Кузнецов В. Ю. Пакет программ НИМФА-2 для решения задач многофазной фильтрации с применением суперкомпьютерных технологий // Тр. XIV межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 112—119.

Butnev O. I., Pronin V. A., Sidorov M. L., Kolesnikov S. S., Kuznetsov V. Yu. Paket programm NIMFA-2 dlya resheniya zadach mnogofaznoy filtratsii s primeneniem superkompyuternykh tekhnologiy // Tr. XIV mezhd. konf. "Supervychisleniya i matematicheskoe modelirovanie". Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2012. S. 112—119.

- 2. Diersch H. J. G. Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media. Springer, 2014.
- Simunek J., Sejna M., Saito H., Sakai M., van Genuchten M. Th. The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably Saturated Media. Version 4.0. HYDRUS Software Series 3. Riverside, California: Department of Environmental Sciences, University of California Riverside, 2008. P. 315.
- 4. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Карпов А. П., Кузнецов В. Ю., Петров Д. А., Резчиков В. Ю., Стаканов А. Н., Щаникова Е. Б. Параллельные решатели СЛАУ в пакетах программ Российского федерального ядерного центра — Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики // Вестник ПНИПУ. Аэрокосмическая техника. 2016. Вып. 47. С. 73—92.

Aleynikov A. Yu., Barabanov R. A., Bartenev Yu. G., Erzunov V. A., Karpov A. P., Kuznetsov V. Yu., Petrov D. A., Rezchikov V. Yu., Stakanov A. N., Shchanikova E. B. Parallelnye reshateli SLAU v paketakh programm Rossiyskogo federalnogo yadernogo tsentra — Vserossiyskogo nauchnoissledovatelskogo instituta eksperimentalnoy fiziki // Vestnik PNIPU. Aerokosmicheskaya tekhnika. 2016. Vyp. 47. S. 73—92.

- 5. Celia M. A., Bouloutas E. J, Zabra R. L. A General mass conservative numerical solution for unsaturated flow equation // Water Resources Research. 1990. Vol. 26, No 7. P. 1483-96.
- Webb S. W. Generalization of Ross' tilted capillary barrier diversion formula for different two-phase characteristic curves // Ibid. 1997. Vol. 33, No 8. P. 1855–1859.
- 7. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. М.: Наука, 1977. Polubarinova-Kochina P. Ya. Teoriya dvizheniya gruntovykh vod. М.: Nauka, 1977.
- Баренблатт Г. И., Ентов В. М., Рыжик В. М. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. М.: Недра, 1972.
   Barenblatt G. I., Entov V. M., Ryzhik V. M. Teoriya nestatsionarnoy filtratsii zhidkosti i gaza. М.: Nedra, 1972.

Статья поступила в редакцию 15.02.19.

MODELS OF SATURATED-UNSATURATED AND CONFINED-UNCONFINED FLOWS IN "NIMFA" SOFTWARE / A. N. Bakhaev, P. A. Mashenkin, M. L. Sidorov (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region).

The paper describes models of saturated-unsaturated and confined-unconfined isothermic flows in porous media. Both qualitative and quantitative agreement between the results obtained for problems having analytical solutions and problems solved using the commercial code FEFLOW has been demonstrated.

 $Keywords\colon$  NIMFA software, saturated-unsaturated flow, confined-free flows, verification, cross-verification.

УДК 625.033.37

# МОДЕЛЬ ДЕФОРМИРУЕМОСТИ ГРУНТОВОГО ОСНОВАНИЯ ЖЕЛЕЗНОДОРОЖНОГО ПУТИ ПРИ ПРОПУСКЕ ДЛИННОСОСТАВНЫХ ПОЕЗДОВ

В. П. Соловьёв, А. В. Анисин, И. М. Анисина, С. С. Надёжин, М. М. Железнов, В. О. Певзнер, И. В. Третьяков (ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области; ВНИИЖТ, г. Москва)

Проводится расширение ранее предложенной расчетной методики на область грунтов, обладающих вязкоупругими свойствами. Проанализированы экспериментальные данные, полученные сотрудниками ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро. Показано, что наилучшей реологической моделью, описывающей деформацию железнодорожного пути под поездной нагрузкой, является модель стандартного линейного твердого тела с параметрами  $G_1 = 17 \,\mathrm{MIa}, G_2 = 41 \,\mathrm{MIa}, \eta_2 = 6 \cdot 10^3 \,\mathrm{MIa} \cdot \mathrm{c}$ . Получено получаналитическое решение уравнения деформации грунтового основания под действием циклической нагрузки от проходящего длинносоставного поезда с последующей релаксацией.

*Ключевые слова:* железнодорожный путь, подбалластное основание, осадка пути, модель стандартного линейного твердого тела, вязкость.

## Введение

Одним из направлений обеспечения роста провозной способности железных дорог является применение тяжеловесных поездов, в том числе использующих вагоны с повышенной осевой нагрузкой.

Обеспечение безопасного и бесперебойного движения поездов с установленными скоростями в этих условиях требует постоянного совершенствования системы технического обслуживания пути. Одним из важнейших элементов этой системы является прогноз изменения состояния пути, в частности скорости роста неровностей в вертикальной продольной плоскости. Информация по этому вопросу является важнейшим элементом системы определения потребности в проведении выправочных работ и базой математического моделирования прогнозных процессов развития неровностей [1].

Для получения прогнозов состояния пути требуются методики, позволяющие вычислять скорость роста амплитуд неровностей в вертикальной продольной плоскости в зависимости от конструкции верхнего строения пути, характеристик подбалластного основания, включая земляное полотно, и уровня нагруженности пути поездной нагрузкой. Помимо методик, основанных на обработке статистических данных о наличии неровностей и их параметрах в различных условиях эксплуатации с построением вероятностных моделей по ансамблю данных с различных участков или длительным наблюдениям на случайных участках, несомненный интерес представляют детерминированные расчеты на базе математического моделирования физических процессов, приводящих к развитию неровностей.

В данной работе проводится расширение расчетной методики, предложенной в работах [2, 3], на область грунтов, обладающих вязкоупругими свойствами. В экспериментальных работах ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро для длинносоставных поездов обнаружен эффект роста сигнала тензометрических датчиков, установленных на подошве рельса, по мере движения поездов, а также измерена длительная релаксация упругой деформации головки рельса после их прохождения [4]. Как будет показано ниже, эти эффекты могут быть объяснены наличием в реологической модели грунтового основания вязкоупругого элемента (тела Кельвина).

Так как тензометрические измерения показывают, что деформации рельсов на исследованных участках превышают расчетные и увеличиваются по мере прохождения поезда, представляет большой интерес исследовать влияние данного эффекта на динамику роста неровностей в вертикальной плоскости с целью совершенствования прогнозной методики состояния пути.

### Экспериментальные данные и расчетный анализ

На рис. 1 приведена зависимость осадки рельса от времени при прохождении и после прохождения поезда. Форма кривой, демонстрирующая медленную релаксацию пути после прохождения поезда, заставляет предполагать, что, кроме упругой деформации, в реологической схеме пути следует учесть вязкий элемент.

Были рассмотрены три реологические модели [5] поведения вязкоупругого тела, пригодные для описания поведения грунта с полной релаксацией:

- 1) модель Кельвина;
- 2) обобщенная (двойная) модель Кельвина;
- 3) модель стандартного линейного твердого тела.

Реологические схемы рассмотренных моделей приведены на рис. 2. Уравнение для модели Кельвина записывается в виде [5]





Рис. 1. Зависимость упругой осадки пути под поездом от времени восстановления после прохождения поезда (в период оттаивания и падения уровня воды в болоте): ♦ — экспериментальные данные; — — модель стандартного твердого тела; 1—3 — опорные точки



Рис. 2. Реологические схемы моделей грунтового основания: *a* — модель Кельвина; *б* — обобщенная модель Кельвина; *в* — модель стандартного линейного твердого тела

Здесь  $\varepsilon$  — относительная деформация; <br/>  $\sigma$  — напряжение;  $\eta$  — вязкость; <br/>  $\tau=G/\eta,$ гдеG — модуль упругости.

Уравнение для обобщенной модели Кельвина записывается в виде

$$\frac{d^2\varepsilon}{dt^2} + (\tau_1 + \tau_2)\frac{d\varepsilon}{dt} + \tau_1\tau_2\varepsilon = F(t), \quad F(t) = \frac{\eta_1 + \eta_2}{\eta_1\eta_2}\frac{d\sigma}{dt} + \frac{G_1 + G_2}{\eta_1\eta_2}\sigma.$$
(2)

Согласно [5] уравнение для модели стандартного твердого тела имеет вид

$$\frac{d\varepsilon}{dt} + \tau_2 \varepsilon = \frac{G_1 + G_2}{G_1 \eta_2} \sigma + \frac{1}{G_1} \frac{d\sigma}{dt},\tag{3}$$

где  $\sigma(t)$  — функция, задающая нагрузку на шпалу в зависимости от времени.

Уравнения (1) и (3) могут быть решены аналитически, уравнение (2) решалось численно методом конечных разностей. Решение уравнения (1) для тела Кельвина имеет вид

$$\varepsilon(t) = \exp(-\tau t) \int_{0}^{t} F(t') \exp(\tau t') dt', \quad F(t) = \frac{1}{\eta} \sigma$$

Решение уравнения (3) для модели стандартного линейного твердого тела:

$$\varepsilon(t) = \exp\left(-\tau_2 t\right) \int_0^t F\left(t'\right) \exp\left(\tau_2 t'\right) dt', \quad F(t) = \frac{G_1 + G_2}{G_1 \eta_2} \sigma + \frac{1}{G_1} \frac{d\sigma}{dt}.$$
(4)

Для случая деформации грунтового основания пути под действием поездной нагрузки возьмем зависимость циклических напряжений на верхней границе грунта в виде

$$\sigma(t) = \begin{cases} \frac{\sigma_0}{2} \left( 1 - \cos\left(tN\frac{2\pi}{T}\right) \right) & \text{при} \quad t \le T; \\ 0 & \text{при} \quad t > T, \end{cases}$$
(5)

где  $\sigma_0$  — нагрузка на грунтовое основание при прохождении оси; T — время прохода поезда; N — количество осей, прошедших над шпалой за время T.

В уравнениях (1)—(3) напряжение  $\sigma$  зависит не только от времени, но и от глубины, поскольку нагрузка распределяется вглубь слоя грунта неравномерно. Запишем выражение (5) в виде

$$\sigma\left(t\right) = \sigma_0 \sigma_1\left(t\right)$$

где

$$\sigma_1(t) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left( 1 - \cos\left(tN\frac{2\pi}{T}\right) \right) & \text{при} \quad t \le T; \\ 0 & \text{при} \quad t > T \end{cases}$$

является безразмерной функцией. Тогда решение уравнения (3) можно записать в виде

$$\varepsilon(t) = \sigma_0 \xi(t)$$

где  $\xi(t)$  — решение уравнения (3), соответствующее  $\sigma_1(t)$ . В этом случае  $\xi(t)$  будет измеряться в Па<sup>-1</sup>.

Если рассматривать массив однородного грунта большой толщины, в котором параметры упругости и вязкости не меняются по глубине, но меняется по глубине нагрузка, то можно мысленно разделить массив грунта на слои, нагрузка на каждый из которых считается постоянной по глубине. То есть нагрузка на *k*-й слой по глубине может быть записана в виде

$$\sigma_k\left(z,t\right) = \sigma_{0k}\sigma_1\left(t\right),$$

где *z* — координата глубины слоя грунта. Относительная деформация *k*-го слоя грунта выражается формулой

$$\varepsilon_{k}(t) = \sigma_{0k}\xi(t)$$

Тогда смещение верхней границы основания грунта r(t) равно

$$r(t) = \sum_{k} \varepsilon_{k} dz_{k} = \sum_{k} \sigma_{0k} \xi(t) dz_{k} \simeq \xi(t) \int \sigma(z) dz, \quad \varepsilon(t) = \frac{r(t)}{H},$$

где *H* — толщина слоя грунтового основания. Таким образом, зависимость функции нагрузки от глубины *z* можно учесть, проинтегрировав функцию нагрузки по глубине.

На рис. 3 приведены экспериментальные данные зависимости просадки уровня головки рельса (УГР), полученные ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро, а также результаты расчетного моделирования просадки УГР с использованием описанных выше реологических моделей (в предположении, что деформация грунтового основания определяет характер процесса). Расчеты проведены для нагрузки вида (5) с параметрами  $\sigma_0 = 3,4 \cdot 10^4 \text{ Па}, T = 1,2 \text{ мин},$  толщина слоя грунтового основания H = 4 м. Параметры реологических моделей были проварьированы до наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных данных. Итоговые значения параметров приведены в таблице.

Как видно из графиков на рис. 3, *a*, *б*, модель Кельвина удовлетворительно описывает изменение деформации грунта при нагрузке, но плохо описывает изменение деформации грунта после прохождения поезда. Модель стандартного линейного твердого тела хорошо описывает экспериментальные данные по изменению деформации грунта при нагрузке и так же хорошо описывает изменение деформации грунта после прохождения поезда. Обобщенная модель Кельвина так же хорошо описывает изменение деформации грунта при нагрузке и после прохождения поезда, как и модель стандартного линейного твердого тела.

При сравнении параметров упругости и вязкости, при которых эти модели хорошо описывают экспериментальные данные, видно, что параметры  $G_1$ ,  $G_2$  и  $\eta_2$  в этих моделях близки между собой,



Рис. 3. Расчетная зависимость от времени просадки УГР в сравнении с экспериментальными данными: *a* — на временном интервале 18 мин от начала прохождения поезда; *б* — на временном интервале 4 мин от начала прохождения поезда; ◆ — экспериментальные данные; — — модель стандартного твердого тела; — — обобщенная модель Кельвина; — — модель Кельвина

<b>TT</b>					T7	TT
LISNSMOTHLI	noonoruuocvuv	ΜΟΠΟΠΟΙΙ	ппа и	VUSCTVS	$K \cap P \pi \cap n = $	INUCODNO
<b>Hapamerph</b>	DEDVIOLU JECKUV	моделен	для	y latina	тордор	IIMIOSCPU
	1	1 1		/	1 1 1	

Модель	$G_1, M\Pi a$	$G_2, M\Pi a$	$\eta_1,  \mathrm{M\Pi a \cdot c}$	$\eta_2,  \mathrm{M\Pi a \cdot c}$
Тело Кельвина	13,5	_	$5.10^{2}$	
Двойное тело Кельвина	41	17	$1,37 \cdot 10^2$	$6 \cdot 10^{3}$
Модель стандартного				
линейного твердого тела	41	17	—	$6 \cdot 10^{3}$

а параметр  $\eta_1$  много меньше, чем  $\eta_2$ . Сравнивая уравнения для этих моделей, получаем, что при  $\eta_1 \to 0$  обобщенная модель Кельвина переходит в модель стандартного линейного твердого тела.

При  $\eta_1 \ll \eta_2$  графики деформации грунта также похожи, с той лишь разницей, что в обобщенной модели Кельвина осцилляции при прохождении поезда значительно меньше за счет введения вязкости  $\eta_1$ . Таким образом, выбор модели для описания просадки грунта зависит от того, какие осцилляции происходят на самом деле. Ниже будем рассматривать модель стандартного линейного твердого тела, поскольку она хорошо описывает просадку УГР и, в отличие от обобщенной модели Кельвина, имеет аналитическое решение.

Итак, просадку грунта можно описать приближенным выражением вида (4). Это выражение содержит три независимых параметра грунта:  $G_1$ ,  $G_2$  и  $\tau_2 = G_2/\eta_2$ . Эти параметры можно однозначно определить из графика зависимости просадки УГР от времени, взяв три опорные точки на экспериментальной кривой: максимальной деформации грунта, максимальной остаточной деформации грунта после прохождения поезда и произвольно выбранную точку на участке релаксации грунта. На рис. 1 эти точки отмечены цифрами 1—3. Максимальная деформация грунта (точка 1) соответствует моменту  $t_1 = T$ , максимальная остаточная деформация (точка 2) наблюдается в момент снятия нагрузки  $t_2 = T + \delta$ , где  $\delta$  — малая величина, которой можно пренебречь. Точка 3 соответствует моменту  $t_3 > T$ .

Выражения, записанные для выбранных точек, образуют систему трех уравнений для трех неизвестных:  $G_1, G_2$  и  $\tau_2$ . Решая ее, однозначно получаем выражения для параметров грунта, соответствующие данной экспериментальной кривой:

$$G_1 = \frac{\sigma_0}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}; \quad \tau_2 = -\frac{1}{t_3 - T} \ln \frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_2}; \quad G_2 = \frac{\sigma_0}{2\varepsilon_2} \left(1 - \exp\left(-\tau_2 T\right)\right).$$

С учетом погрешности измерений и вариации выбора опорных точек на экспериментальной кривой значения параметров грунта могут варьироваться примерно на 10%.

#### Заключение

В работе проанализированы экспериментальные данные, полученные сотрудниками ВНИИЖТ [4] на перегоне Ковдор—Пинозеро. Представлены три реологические модели для описания деформации пути под поездной нагрузкой. Показано, что наилучшей реологической моделью, описывающей деформацию грунтового основания железнодорожного пути, является модель стандартного линейного твердого тела. Для этой модели получено аналитическое решение уравнения деформации грунтового основания циклической нагрузки от проходящего длинносоставного поезда с последующей релаксацией.

Значения параметров для участка перегона Ковдор—Пинозеро, на котором специалисты ВНИИЖТ получили представленные в работе [4] экспериментальные данные, приведены в таблице.

Планируется использование полученной реологической модели с определенными параметрами в верификационных расчетах динамики роста остаточных деформаций пути в вертикальной плоскости для расчетной методики, изложенной в работах [2, 3].

Данная работа выполнена в рамках проекта ориентированных фундаментальных исследований Российского фонда фундаментальных исследований по актуальным междисциплинарным темам в интересах ОАО "РЖД" (конкурс офи-м-РЖД № 17-20-01152 "Научное обоснование методов определения физико-математических закономерностей развития деформаций пути в зависимости от частотного состава и длительности приложения нагрузок применительно к пропуску тяжеловесных поездов различной длины и с различными скоростями, сформированных из вагонов с повышенными осевыми нагрузками").

#### Список литературы

1. Шапетько К. В. Исследования накопления деформаций железнодорожного пути на участке испытаний вагонов с осевой нагрузкой 27 тс // Вестник ВНИИЖТ. 2017. Т. 76, № 4. С. 238—242.

Shapetko K. V. Issledovaniya nakopleniya deformatsiy zheleznodorozhnogo puti na uchastke ispytaniy vagonov s osevoy nagruzkoy 27 ts. Vestnik nauchno-issledovatelskogo instituta zheleznodorozhnogo transporta // Vestnik VNIIZhT. 2017. T. 76,  $\mathbb{N}$  4. S. 238–242.

- Соловъёв В. П., Анисин А. В., Надёжин С. С., Певзнер В. О., Третьяков В. В., Третьяков И. В. Моделирование процесса накопления остаточных деформаций пути с использованием суперЭВМ // Фундаментальные исследования для долгосрочного развития железнодорожного транспорта. М.: Интекст, 2013. С. 185—192.
   Solovev V. P., Anisin A. V., Nadezhin S. S., Pevzner V. O., Tretyakov V. V., Tretyakov I. V. Modelirovanie protsessa nakopleniya ostatochnykh deformatsiy puti s ispolzovaniem SuperEVM // Fundamentalnye issledovaniya dlya dolgosrochnogo razvitiya zheleznodorozhnogo transporta. М.: :
- Pevzner V. O., Nadezhin S. S., Anisin A. V., Tretyakov I. V. Assessment of railway track deformability at deterioration locations and possible changes in track alignment works scheduling caused by the increase in car axle-loads // VNIIZhT Bulletin. 2014. Vol. 1. P. 36–39.
- Железнов М. М. Певзнер В. О., Соловьев В. П., Анисин А. В., Надежин С. С., Третьяков И. В. Влияние длительности и частоты приложения нагрузки на напряженно-деформированное состояние пути // Вестник ВНИИЖТ. 2018. Т. 77, № 6. С. 364—367. Zheleznov M. M., Pevzner V. O., Solovev V. P., Anisin A. V., Nadezhin S. S., Tretyakov I. V. Vliyaniye dlitelnosti i chastoty prilozheniya nagruzki na napryazhenno-deformirovannoe sostoyanie puti // Vestnik VNIIZhT. 2018. Т. 77, № 6. S. 364—367.
- 5. *Мейз Дж.* Теория и задачи механики сплошных сред. М.: Мир, 1974. *Meiz Dzh.* Teoriya i zadachi mekhaniki sploshnykh sred. М. : Mir, 1974.

Intekst, 2013. S. 185-192.

Статья поступила в редакцию 19.02.19.

A MODEL OF THE RAILWAY GROUND BED DEFORMATION BY PASSING LONG TRAINS / V. P. Solovev, A. V. Anisin, I. M. Anisina, S. S. Nadezhin (FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region); M. M. Zheleznov, V. O. Pevzner, I. V. Tretyakov (VNIIZhT, Moscow).

The paper describes the extension of the earlier suggested computation technique to soils having viscoelastic properties. The experimental data obtained by the VNIIZhT employees for the railway track section Kovdor-Pinozero has been analyzed. It has been demonstrated that the best rheological model describing the railway deformation under the load of a passing train is the model of a standard linear solid body with parameters  $G_1 = 17$  MPa,  $G_2 = 41$  MPa,  $\eta_2 = 6 \cdot 10^3$  MPa·s. The semi-analytical solution to the equation of ground bed deformation under a cyclic load from a passing long train with subsequent relaxation has been found.

*Keywords*: railway, sub-ballast foundation, settlement of track, model of a standard linear solid body, viscosity.

## ПАМЯТИ ВИТАЛИЯ ЕФИМОВИЧА ТРОЩИЕВА



Восьмого июня 2019 г. на 88-м году жизни скоропостижно скончался главный научный сотрудник, профессор, крупный российский математик Виталий Ефимович Трощиев.

Виталий Ефимович родился 24 сентября 1931 г. в селе Поповке Кашарского района Ростовской области в семье сельского учителя. В 1954 г. он окончил математико-механический факультет Ленинградского государственного университета и первые 30 лет своей научной деятельности (1954—1984 гг.) проработал в математическом отделении ВНИИЭФ, пройдя путь от молодого специалиста до опытного начальника отдела, крупного ученого в области вычислительной математики. В этот период под руководством и при активном участии Виталия Ефимовича коллективами математиков отделения на отечественных ЭВМ нескольких поколений было создано 15 актуальных производственных кодовых программ расчета физических процессов, протекающих в специзделиях. За создание этих методик и программ и оперативное проведение большого количества сложных расчетов по тематике института В. Е. Трощиеву в составе авторских коллективов были присуждены Ленинская (1962 г.) и Государственная (1991 г.) премии СССР. Он защитил кандидатскую (1967 г.) и докторскую (1980 г.) диссертации.

В последующие 34 года (1985—2018 гг.), возглавив в 1985 г. коллектив математического отдела в Троицком институте инновационных и термоядерных исследований (ТРИНИТИ), Виталий Ефимович вместе с учениками энергично продолжил развитие созданных во ВНИИЭФ численных методик решения кинетических уравнений переноса частиц. Это консервативные схемы с "весовыми" дополнительными соотношениями в ячейке, учитывающими направление характеристик; алгоритмы согласования разностной схемы для поправочных уравнений с основной схемой с целью ускорения итераций; разностные схемы на расширенных шаблонах на сетках из многоугольников; алгоритмы балансного зануления отрицательных значений сеточных величин, сохраняющие фронты волн. Также был найден ряд более точных алгоритмов при решении уравнений газодинамики с лучистой теплопроводностью. Виталий Ефимович Трощиев — автор и соавтор свыше 30 опубликованных научных работ, научный руководитель по 11 защищенным кандидатским диссертациям и по многим дипломным работам студентов МИФИ. Несколько его учеников защитили докторские диссертации.

Виталий Ефимович обладал острым практическим умом в сочетании с ровным доброжелательным характером, что всегда создавало творческую, демократичную атмосферу в руководимом им коллективе.

Скорбим о случившемся. Светлая память о Виталии Ефимовиче Трощиеве навсегда сохранится в наших сердцах.

Виталий Ефимович Трощиев похоронен в г. Троицке Московской области 10 июня 2019 г.

Ученики В. Е. Трощиева, сотрудники математического отделения ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"

# СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Алексеев Алексей Владимирович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: avaj@vniief.ru

Анисин Андрей Владимирович — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: AVAnisin@vniief.ru

Анисина Инга Михайловна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: i\_anisina@vniief.ru

Бахаев Александр Николаевич — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: ANBakhaev@vniief.ru

**Бнятов Алексей Владимирович** — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: AlVBnyatov@vniief.ru

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

**Воропинов Андрей Александрович** — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: AAVoropinov@vniief.ru

**Железнов Максим Максимович** — АО "ВНИИЖТ", г. Москва, заместитель начальника управления, *e-mail*:m.zheleznov@mail.ru

Краюхин Сергей Андреевич — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, младший научный сотрудник, *e-mail*: SAnKrayukhin@vniief.ru

**Крутько Николай Александрович** — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: NAKrutko@vniief.ru

**Машенькин Павел Александрович** — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: PAMashenkin@vniief.ru

**Надёжин Сергей Станиславович** — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: SSNadezhin@vniief.ru

**Новиков Иван Геннадьевич** — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: IGNovikov@vniief.ru

**Певзнер Виктор Ошерович** — АО "ВНИИЖТ", г. Москва, главный научный сотрудник, *e-mail*: vpevzner@list.ru

Половникова Татьяна Николаевна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник

**Раткевич Сергей Сергеевич** — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: SSRatkevich@vniief.ru

**Сидоров Михаил Львович** — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: MLSidorov@vniief.ru

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

Соловьёв Вячеслав Петрович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный руководитель РФЯЦ-ВНИИЭФ, директор Института теоретической и математической физики, *e-mail*: VPSolovev@vniief.ru

**Третьяков Иван Владимирович** — АО "ВНИИЖТ", г. Москва, научный сотрудник, *e-mail*: TRETIV@gmail.com

Чубарешко Илья Сергеевич — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина",

г. Снежинск Челябинской области, младший научный сотрудник, *e-mail*: i.s.chubareshko@mail.ru Шестаков Александр Александрович — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина", г. Снежинск Челябинской области, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: A.A.Shestakov2012@yandex.ru Янилкин Юрий Васильевич — ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, главный научный сотрудник, *e-mail*: YVYanilkin@vniief.ru

## INFORMATION ABOUT AUTHORS

Alekseev Aleksey Vladimirovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, e-mail: avaj@vniief.ru Anisin Andrey Vladimirovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, e-mail: AVAnisin@vniief.ru Anisina Inga Mikhailovna – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, *e-mail*: i\_anisina@vniief.ru Bakhaev Alexander Nikolaevich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, e-mail: ANBakhaev@vniief.ru Bnyatov Aleksey Vladimirovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, *e-mail*: AlVBnyatov@vniief.ru Volodina Nataliya Aleksandrovna – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, e-mail: NAVolodina@vniief.ru **Voropinov Andrey Aleksandrovich** – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, leading scientist, e-mail: AAVoropinov@vniief.ru **Zheleznov Maksim Maksimovich** – VNIIZhT, Moscow, deputy head of department, *e-mail*: m.zheleznov@mail.ru Krayukhin Sergey Andreevich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, junior scientist, e-mail: SAnKrayukhin@vniief.ru Krutko Nikolay Aleksandrovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, senior scientist, *e-mail*: NAKrutko@vniief.ru Mashenkin Pavel Aleksandrovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, e-mail: PAMashenkin@vniief.ru Nadezhin Sergey Stanislavovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, e-mail: SSNadezhin@vniief.ru **Novikov Ivan Gennadievich** – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research laboratory, e-mail: IGNovikov@vniief.ru **Pevzner Viktor Osherovich** – VNIIZhT, Moscow, chief scientist, *e-mail*: vpevzner@list Polovnikova Tatyana Nikolaevna – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist Ratkevich Sergey Sergeevich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, *e-mail*: SSRatkevich@vniief.ru Sidorov Mikhail Lvovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, scientist, *e-mail*: MLSidorov@vniief.ru Sokolov Sergey Sergeevich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, head of research department, e-mail: SSSokolov@vniief.ru Solovev Vyacheslav Petrovich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, RFNC-VNIIEF Science Leader Director of the Institute of Theoretical and Mathematical Physics, *e-mail*: VPSolovev@vniief.ru Tretyakov Ivan Vladimirovich – VNIIZhT, Moscow, scientist, *e-mail*: TRETIV@gmail.com Chubareshko Il'ya Sergeevich – FSUE "Acad. E. I. Zababakhin RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelvabinsk region, junior scientist, *e-mail*: i.s.chubareshko@mail.ru Shestakov Alexander Aleksandrovich – FSUE "Acad. E. I. Zababakhin RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelvabinsk region, leading scientist, e-mail: A.A.Shestakov2012@vandex.ru Yanilkin Yuriy Vasilievich – FSUE "RFNC-VNIIEF", Sarov, N. Novgorod region, chief scientist, *e-mail*: YVYanilkin@vniief.ru

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОВЛИЯНИЯ ЗОНЫ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ И ЛОКАЛЬНЫХ ВОЗ-МУЩЕНИЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА В ЗАДАЧЕ ГРАВИТАЦИОН-НОГО ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ / Ю. В. Янилкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 3—17.

Работа посвящена численному моделированию развития отдельного локального возмущения в зоне турбулентного перемешивания, возникающей вследствие неустойчивости Рэлея—Тейлора при постоянном ускорении контактной границы между двумя разноплотными газами. С помощью прямого трехмерного численного моделирования по методике ЭГАК (без моделей турбулентности и вязкости) проведено численное исследование поведения полусферического возмущения на контактной границе двух сред, одна из которых много тяжелее другой. Зона турбулентного перемешивания в задаче формируется вследствие фоновых возмущений контактной границы, заданных в начальный момент времени. Получены закономерности роста отдельных возмущений контактной границы на фоне развития турбулентного перемешивания. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с результатами соответствующих экспериментов Невмержицкого и др. (рис. 13, список лит. — 17).

*Ключевые слова:* неустойчивость Рэлея—Тейлора, зона турбулентного перемешивания, локальное возмущение, прямое численное моделирование, методика ЭГАК.

#### УДК 517.958:536.2

РАЗНОСТНАЯ СХЕМА "УРАЛ" ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГИПЕРБО-ЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ *P*<sub>1</sub>-УРАВНЕНИЙ / И. С. Чубарешко, А. А. Шестаков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 18—34.

Вопросы построения монотонных разностных схем при решении уравнения переноса теплового излучения в  $P_1$ -приближении рассматриваются во многих работах. В данной работе предложена новая разностная схема, улучшающая монотонность решения при аппроксимации гиперболических уравнений. Для этого используется методология построения диссипативных схем для системы  $P_1$ уравнений, записанной в инвариантах Римана. Особенностью новой схемы является учет функции Планка в соотношениях, связывающих значения интегральных средних величин со значениями величин в узлах разностных интервалов (рис. 4, список лит. — 27).

*Ключевые слова:* уравнение переноса в *P*<sub>1</sub>-приближении, разностная схема.

АЛГОРИТМ ИТЕРАЦИОННОЙ КОРРЕКЦИИ ВРЕМЕН ДЕТО-НАЦИИ ЗА СЧЕТ УЧЕТА НАПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ДЕ-ТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В МЕТОДИКЕ "ЛЭГАК" / Н. А. Володина, С. А. Краюхин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 35—47.

Приводится описание нескольких методов повышения точности базового пошагового алгоритма расчета идеальной детонации ВВ в методике ЛЭГАК. Основное внимание уделено алгоритму итерационной коррекции времен инициирования ВВ за счет учета направления движения детонационной волны. Для демонстрации применимости алгоритма приведены результаты расчетов нескольких методических задач по распространению детонационной волны в ВВ (рис. 17, табл. 4, список лит. — 5).

*Ключевые слова:* взрывчатое вещество, идеальная детонация, время инициирования детонации, скорость распространения детонационной волны, фронт детонационной волны.

#### УДК 519.6

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ GROUND2 ОБРАБОТКИ ОЦЕНЕН-НЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ И РАСЧЕТА СИСТЕМ ГРУППО-ВЫХ КОНСТАНТ / А. В. Алексеев, А. В. Бнятов, Н. А. Крутько, С. С. Раткевич // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 48—60.

Приводится описание комплекса программ GROUND2, предназначенного для обработки оцененных ядерных данных и расчета единых согласованных систем групповых констант взаимодействия нейтронов, гамма-квантов и быстрых заряженных частиц с ядрами изотопов. Представлена структура комплекса программ, возможности программной оболочки GDF комплекса, а также технология задания входных данных и проведения расчетов спектральных и групповых характеристик взаимодействия частиц с ядрами. Показаны возможности комплекса в части хранения и визуализации групповых данных (рис. 13, табл. 1, список лит. — 12).

*Ключевые слова:* константное обеспечение, процессинговый код, база данных, оцененные ядерные данные, система групповых констант.

МЕТОДЫ БАЛАНСИРОВКИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ НАГРУЗ-КИ В МЕТОДИКЕ "ТИМ" / С. С. Соколов, И. Г. Новиков, А. А. Воропинов, Т. Н. Половникова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 61—72.

Рассматриваются методы балансировки вычислительной нагрузки, реализованные в рамках методики ТИМ. Описывается набор критериев для проведения динамической и квазидинамической балансировок. Динамическая балансировка заключается в переносе расчета ячеек с одного процесса на другой, квазидинамическая в полной переинициализации данных для задачи без остановки ее расчета и построении новой декомпозиции. Рассмотрены области применения алгоритмов динамической и квазидинамической балансировок.

Применение методов балансировки вычислительной нагрузки позволяет эффективно загрузить процессорное поле, выделенное на задачу, и ускорить счет.

*Ключевые слова:* методика ТИМ, декомпозиция, динамическая балансировка, квазидинамическая балансировка, критерии оценки качества декомпозиции (рис. 7, табл. 5, список лит. — 13).

*Ключевые слова:* методика ТИМ, декомпозиция, динамическая балансировка, квазидинамическая балансировка, критерии оценки качества декомпозиции.

### УДК 519.6

МОДЕЛИ НАСЫЩЕННО-НЕНАСЫЩЕННОЙ И НАПОР-НО-БЕЗНАПОРНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В КОМПЛЕКСЕ ПРОГ-РАММ "НИМФА" / А. Н. Бахаев, П. А. Машенькин, М. Л. Сидоров // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 73—83.

Представлено описание моделей насыщенно-ненасыщенной и напорно-безнапорной изотермической фильтрации жидкости в пористых средах. Приведены основные уравнения моделируемых процессов, а также используемые сетки. Показано качественное и количественное согласие результатов на задачах с аналитическими решениями и задачах, рассчитанных по коммерческой программе FEFLOW (рис. 10, табл. 1, список лит. — 8).

*Ключевые слова:* программный комплекс НИМФА, насыщенноненасыщенная фильтрация, напорно-безнапорная фильтрация, верификация, кросс-верификация.

### УДК 625.033.37

МОДЕЛЬ ДЕФОРМИРУЕМОСТИ ГРУНТОВОГО ОСНОВА-НИЯ ЖЕЛЕЗНОДОРОЖНОГО ПУТИ ПРИ ПРОПУСКЕ ДЛИН-НОСОСТАВНЫХ ПОЕЗДОВ / В. П. Соловьёв, А. В. Анисин, И. М. Анисина, С. С. Надёжин, М. М. Железнов, В. О. Певзнер, И. В. Третьяков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 84—89.

Проводится расширение ранее предложенной расчетной методики на область грунтов, обладающих вязкоупругими свойствами. Проанализированы экспериментальные данные, полученные сотрудниками ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро. Показано, что наилучшей реологической моделью, описывающей деформацию железнодорожного пути под поездной нагрузкой, является модель стандартного линейного твердого тела с параметрами  $G_1 = 17 \text{ MIa}, G_2 = 41 \text{ MIa}, \eta_2 = 6 \cdot 10^3 \text{ MIa} \cdot \text{с.}$  Получено полуаналитическое решение уравнения деформации грунтового основания под действием циклической нагрузки от проходящего длинносоставного поезда с последующей релаксацией (рис. 3, табл. 1, список лит. — 5).

*Ключевые слова:* железнодорожный путь, подбалластное основание, осадка пути, модель стандартного линейного твердого тела, вязкость.

NUMERICAL STUDY OF THE INTERRELATION OF TURBU-LENT MIXING AREA AND LOCAL DISTURBANCES OF INTER-FACE IN THE GRAVITATIONAL TURBULENT MIXING PROB-LEM / Yu. V. Yanilkin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 3. P. 3–17.

The paper discusses the numerical simulation of a separate local disturbance in the turbulent mixing area generated due to the Rayleigh-Taylor instability with a permanently accelerating interface between two gases of different densities. The direct 3D numerical simulation using the EGAK code (without models of turbulence and viscosity) was performed to study the behavior of a semispherical disturbance on an interface of two media, with one of them being significantly heavier than the other. The turbulent mixing area in this problem is generated due to the background disturbances of the interface specified at initial time. Regularities in separate disturbances of the interface growing against the background of developing turbulent mixing have been found. The calculated results are in a good agreement with results of experiments by Nevmerzhitskiy et al.

*Key words*: Rayleigh-Taylor instability, turbulent mixing area, local disturbance, direct numerical simulation, the EGAK code.

DIFFERENCE SCHEME "URAL" FOR SOLVING A HYPERBOLIC SYSTEM OF  $P_1$ -EQUATIONS / I. S. Chubareshko, A. A. Shestakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 3. P. 18–34.

Issues of constructing monotone difference schemes to solve the heat transport equation in the  $P_1$ -approximation are discussed in many papers. This paper offers a new difference scheme that improves the solution monotonicity while approximating the hyperbolic equation. For this purpose, the technique of constructing dissipative schemes for a system of  $P_1$ -equations written in Riemann invariants is used. The specific feature of the new scheme is in accounting the Planck function in expressions describing the relationship between the integral mean values of quantities and the values of quantities at nodes of difference intervals.

Key words: a transport equation in the  $P_1$ -approximation, difference scheme.

AN ALGORITHM OF ITERATIVELY CORRECTING DETONA-TION TIMES BY MEANS OF ACCOUNTING THE MOVING DET-ONATION WAVE DIRECTION IN "LEGAK" CODE / N. A. Volodina, S. A. Krayukhin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 3. P. 35–47.

The paper describes several methods to improve the accuracy of the basic step-by-step algorithm of computing the perfect HE detonation used in the LEGAK code. The paper is focused on the algorithm of iteratively correcting the HE initiation time owing to the account for the direction of a moving detonation wave. The calculated results for several methodological problems of detonation waves propagating in HE are given to demonstrate the algorithm applicability.

*Key words*: high-explosive, perfect detonation, detonation initiation time, a detonation wave propagation velocity, detonation wave front.

THE "GROUND2" SOFTWARE SYSTEM FOR EVALUATED NU-CLEAR DATA PROCESSING AND GROUP CONSTANT SYSTEMS CALCULATION / A. V. Alekseev, A. V. Bnyatov, N. A. Krutko, S. S. Ratkevich // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 3. P. 48–60.

The paper describes the GROUND2 software system for the processing of evaluated nuclear data and calculation of unified self-consistent systems of group constants for interactions of neutrons, gammas, and fast charged particles with nuclei of isotopes. The software system structure and capabilities of the GDF program shell, as well as the procedure of setting input data and calculating spectral and group characteristics of the interaction of particles with nuclei are presented. The software system capabilities of storing and visually representing the group data are demonstrated.

*Key words*: provision of group constants, processing code, database, evaluated nuclear data, group constants system.

COMPUTATIONAL LOAD BALANCING METHODS IN "TIM" CODE / S. S. Sokolov, I. G. Novikov, A. A. Voropinov, T. N. Polovnikova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 3. P. 61-72.

The paper describes the computational load balancing methods implemented in the TIM code. The set of criteria used for the dynamic and quasi-dynamic balancing is described. The dynamic balancing consists in transferring the calculation of cells from one process to another, the quasi-dynamic balancing consists in completely re-initializing the problem data with no interrupts of the computing process and constructing a new decomposition. Fields of application are considered for the dynamic and quasi-dynamic balancing algorithms.

The use of the computational load balancing methods allows efficiently loading the field of processors allocated to solve the problem and speeding up the computational process.

*Key words*: the TIM code, decomposition, dynamic balancing, quasidynamic balancing, criteria for the decomposition quality estimation.

MODELS OF SATURATED-UNSATURATED AND CONFINED-UNCONFINED FLOWS IN "NIMFA" SOFTWARE / A. N. Bakhaev, P. A. Mashenkin, M. L. Sidorov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 3. P. 73–83.

The paper describes models of saturated-unsaturated and confinedunconfined isothermic flows in porous media. Both qualitative and quantitative agreement between the results obtained for problems having analytical solutions and problems solved using the commercial code FEFLOW has been demonstrated.

*Key words*: NIMFA software, saturated-unsaturated flow, verification, cross-verification. A MODEL OF THE RAILWAY GROUND BED DEFORMATION BY PASSING LONG TRAINS / V. P. Solovev, A. V. Anisin, I. M. Anisina, S. S. Nadezhin, M. M. Zheleznov, V. O. Pevzner, I. V. Tretyakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2019. No 3. P. 84–89.

The paper describes the extension of the earlier suggested computation technique to soils having viscoelastic properties. The experimental data obtained by the VNIIZhT employees for the railway track section Kovdor-Pinozero has been analyzed. It has been demonstrated that the best rheological model describing the railway deformation under the load of a passing train is the model of a standard linear solid body with parameters  $G_1 = 17$  MPa,  $G_2 = 41$  MPa,  $\eta_2 = 6 \cdot 10^3$  MPa·s. The semi-analytical solution to the equation of ground bed deformation under a cyclic load from a passing long train with subsequent relaxation has been found.

*Key words*: railway, sub-ballast foundation, settlement of track, model of a standard linear solid body, viscosity.