## ТРУДЫ РФЯЦ-ВНИИЭФ

25

Часть 1

#### ФГУП

### "РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР - ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ"



Научно-исследовательское издание

ВЫПУСК 25

В двух частях

Саров

2020

DOI:10.53403/9785951504937\_2020\_25.1 УДК 539.1(06) ББК 22.38 Т78

Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Научно-исследовательское издание. Вып. 25. В 2 частях. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2020. ISBN 978-5-9515-0492-0 Часть 1. – 308 с. ISBN 978-5-9515-0493-7

В сборнике «Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ» опубликованы результаты научных исследований, а также методических и проектно-конструкторских разработок в области прикладных задач теоретической физики, математического моделирования физических процессов, ядерной физики, физики ядерных реакторов, исследований по термоядерному синтезу, электрофизики, физики ускорителей, приборов и техники эксперимента, физики лазеров, гидродинамики, реологии, материаловедения, средств защиты от несанкционированных действий, электроники, радиотехники, оптоэлектроники.

#### Главный редактор: академик РАН Р. И. Илькаев

Редакционный совет выпуска: академик В. П. Незнамов, академик РАН Ю. А. Трутнев, Е. В. Куличкова, д-р техн. наук Н. А. Билык, канд. физ.-мат. наук С. В. Воронцов, д-р физ.-мат. наук А. Е. Дубинов, д-р техн. наук А. И. Коршунов, канд. физ.-мат. наук С. В. Маврин, д-р техн. наук В. Н. Морозов, д-р техн. наук С. В. Колесников, д-р физ.-мат. наук Б. А. Надыкто, д-р физ.-мат. наук В. А. Раевский, д-р физ.-мат. наук В. Г. Рогачев, канд. физ.-мат. наук В. Г. Куделькин, д-р техн. наук Ю. И. Файков, канд. физ.-мат. наук В. В. Хижняков, д-р техн. наук П. Ф. Шульженко, Ю. М. Якимов

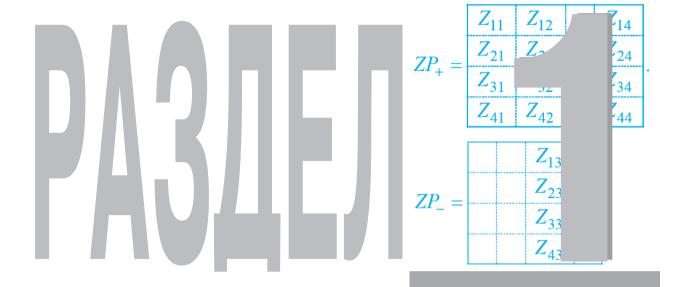
## TPY/ISI POPILIBINADO

#### ВЫПУСК 25

Часть 1

#### СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 1

Горбатенко М. В.	
Решеточные дираковские матрицы и формализм стандартной модели	6



# ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

УДК 539.128.412

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 6 25

## Решеточные дираковские матрицы и формализм стандартной модели

М. В. Горбатенко

Показано, что вещественные матрицы Дирака и волновая функция, отождествляемая с обратной реперной матрицей, адекватно воспроизводят многие из тех атрибутов Стандартной Модели, которые в настоящее время вносятся в эту модель руками. Принципиальным моментом при этом является использование так называемых матриц Дирака решетчатого типа и инвариантных проекторов ранга 3.

#### 1. Введение

Стандартная Модель (СМ) включает в себя теорию электрослабых взаимодействий Вайнберга — Салама и квантовую хромодинамику и в настоящее время имеет статус базовой модели сильных и электрослабых взаимодействий (см., например, [1–3]). В рамках теории электрослабых взаимодействий Вайнберга — Салама предсказано существование нейтральных токов, массивных бозонов — переносчиков взаимодействий, объяснен огромный массив экспериментальных данных по слабому взаимодействию лептонов и кварков. Этот статус теории подтверждается также и открытием бозона Хиггса [4].

Несмотря на свою эффективность в описании электрослабых взаимодействий частиц, СМ не является, строго говоря, полноценной теорией физических взаимодействий, получающей свои результаты из каких-то первых принципов. По мнению многих исследователей, то, что называется СМ, представляет собой по существу переплетение правил релятивистской квантовой теории поля с совокупностью алгоритмов действий (правил, рецептов) и набором феноменологических атрибутов, которые постулируются и/или вводятся руками и позволяют вычислять те или иные величины, регистрируемые в экспериментах. Ясно, что в такой ситуации актуальной была и остается задача нахождения тех единых принципов, из которых можно было бы вывести алгоритмы СМ и значения феноменологических параметров хотя бы фрагментарно.

Уточним, что мы понимаем под феноменологическими атрибутами. Обычно к их числу относят числовые значения масс частиц, их зарядов, углов смешивания и некоторых других параметров. Но эти параметры – далеко не полный перечень атрибутов, привносимых в СМ извне. Если ограничиться только первым (электронным) поколением лептонов, то извне привносятся такие атрибуты, как:

- 1) наличие только двух типов лептонов (не больше и не меньше): электрона, состоящего из «правой» и «левой» частей, и электронного нейтрино;
- 2) различие лептонов одного поколения по электрическому заряду: «правая» и «левая» части электрона имеют одинаковый электрический заряд, а заряд нейтрино равен нулю;
- 3) различие лептонов одного поколения по массе; в то же время массы «правой» и «левой» частей электрона совпадают;

- 4) наличие симметрии относительно фазовых преобразований, перемешивающих «правую» и «левую» части электрона. Отсюда следует, что электрон является электрически заряженной частицей, а нейтрино нейтральной;
- 5) стерильность правого нейтрино, т. е. оно не взаимодействует с остальными частицами лептонного поколения (за исключением гравитационного взаимодействия).

Не только числовые значения феноменологических параметров, но и атрибуты типа перечисленных должны, казалось бы, следовать из теории. Но пока такой теории нет, и все это заимствуются в конце концов из экспериментов.

В данной работе излагаются результаты исследования такого подхода к описанию частиц с полуцелым спином, в котором используются вещественные дираковские матрицы (ДМ), а волновая функция является не столбцовым биспинором, а матрицей, совпадающей с обратной к так называемой реперной матрице. Подход представляет собой развитие высказанной в [5] гипотезы о том, что вся информация о кинематике и динамике частиц с полуцелым спином в римановых пространствах с метрическим тензором  $g_{\alpha\beta}\left(\alpha,\beta=0,1,2,3\right)$  содержится в полях ДМ  $\gamma_{\alpha}$ , определяемых как

$$\gamma_{\alpha}(x)\gamma_{\beta}(x) + \gamma_{\beta}(x)\gamma_{\alpha}(x) = 2g_{\alpha\beta}(x)E_{4\times4}.$$
 (1)

Здесь  $E_{4\times4}$  — единичная матрица той же матричной размерности 4×4, что и ДМ. Запись волновой функции в виде матрицы рассматривалась в свое время еще Зоммерфельдом в [6], так что рассматриваемый подход является развитием и идей [6]. Заметим, что при определении ДМ согласно (1) вещественные ДМ существуют только при сигнатуре метрического тензора (-+++). ДМ в стандартном представлении, обычно используемые в СМ, связаны с майорановской системой ДМ унитарным преобразованием подобия.

Оказалось, что указанный подход при его последовательном проведении приводит к однозначному предсказанию перечисленных выше феноменологических атрибутов СМ. Этот факт является, как мы полагаем, весьма примечательным, поскольку может подсказать то направление, на котором СМ может быть доведена до уровня фундаментальной теории.

В начале работы приводятся сведения из теории ДМ, необходимые в том числе и для пояснения обозначений. Часть свойств ДМ считается известной (см., например, [5] и цитированную там литературу). К числу известных вопросов относятся:

- связь между мировыми и локальными системами ДМ; реперная матрица;
- дискретные автоморфизмы;
- ковариантное дифференцирование ДМ и реперной матрицы;
- инвариантные преобразования дифференциально-алгебраических соотношений с использованием ДМ.

Далее вводятся новые или мало известные свойства ДМ и волновых функций. К числу таких относятся понятие вакуумных систем ДМ, запись волновой функции в форме Зоммерфельда [6], т. е. в виде матрицы  $4\times4$ , и отождествление ее с матрицей, обратной к реперной матрице. Извлечение информации о кинематике и динамике поля частиц со спином 1/2 производится с помощью умножения волновой функции на проекторы, среди которых особую роль играют проекторы ранга 3 и 1. Для введения последних используется матрица I, осуществляющая преобразование стандартных матриц «ро» в матрицы «сигма» и наоборот.

<sup>\*</sup> Вещественные системы ДМ будем (как это обычно делается) называть ДМ в майорановском представлении.

В рамках алгебры вещественных ДМ и вещественной волновой функции воспроизводятся кинематические атрибуты СМ. Для воспроизведения динамических атрибутов используется понятие решеточных ДМ, введенное в [7], и конструкция лагранжиана, алгебраическая часть которого содержит различные степени антиэрмитизирующей матрицы.

Приведем примеры воспроизведения атрибутов СМ применительно к электронному поколению лептонов.

На основе матрицы I может быть построена система проекторов типа  $(3;1)^{**}$ . Умножение волновой функции справа на проекторы типа (3;1) позволяет расщепить мультиплет из четырех состояний частиц со спином 1/2 на два семейства состояний. Одно семейство состоит из одного состояния («правое» нейтрино), а другое семейство — из трех («правая» и «левая» части электрона и «левое» нейтрино). Этот результат получен в рамках использования только вещественных чисел, которые входят составной частью во все другие классы чисел, и, по-видимому, носит универсальный («надквантовый») характер.

Другой результат состоит в доказательстве того, что один и тот же лагранжиан приводит к динамическим решениям, решениями которых являются различные вакуумные системы ДМ. Система ДМ, построенная на базисных векторах ортонормированной кубической решетки  $Z_4$ , удовлетворяет динамическим уравнениям тождественно. Вакуумная система ДМ, построенная на базисных векторах решетки  $D_4$ , описывает мультиплет частиц со спином 1/2, который расщепляется инвариантным образом на две группы частиц с разными массами. Одна группа содержит электронные состояния, а другая – нейтринные.

В работе приводятся и другие результаты, которые обсуждаются в последнем разделе. Главный результат работы состоит в доказательстве того, что формализм вещественных ДМ с волновой функцией, отождествляемой с обратной реперной матрицей, адекватно отражает многие из тех атрибутов СМ, которые в настоящее время вносятся в СМ руками. Представленные результаты позволяют надеяться на получение более полного воспроизведения атрибутов СМ при переходе от вещественных ДМ к формализму комплексных, кватернионных и октонионных ДМ.

#### 2. Дираковские матрицы. Локальные и мировые ДМ

Согласно общей теории относительности (ОТО) наблюдаемое пространство является 4-мерным римановым пространством с сигнатурой 1(-) & 3(+). Пространство такого типа описывается метрическим тензором  $g_{\alpha\beta}(x)$ , компоненты которого являются вещественными функциями координат. Для описания в таком пространстве полей частиц со спином 1/2 необходимо ввести дираковские матрицы  $\gamma_{\alpha}(x)$ , удовлетворяющие соотношениям (1). Известно, что существует реализация ДМ в виде вещественных матриц  $4\times4$ . Такие ДМ называются дираковскими матрицами в майорановском представлении.

Известно, что в каждой точке риманова пространства метрический тензор  $g_{\alpha\beta}(x)$  связан с метрическим тензором в касательном плоском пространстве  $\eta_{\mu\nu}$  соотношением

 $<sup>^{**}</sup>$  Обозначение типа (3;1) указывает ранги проекторов, входящих в состав полной системы проекторов.

$$g_{\alpha\beta}(x) = H_{\overline{\alpha}}^{\mu}(x)H_{\overline{\beta}}^{\nu}(x)\eta_{\mu\nu}.$$
 (2)

Здесь  $H^{\underline{\mu}}_{\overline{\alpha}}(x)$  – реперные векторы, удовлетворяющие условиям

$$H_{\overline{\alpha}}^{\mu}(x)H_{\overline{\beta}}^{\nu}(x)\eta_{\mu\nu} = g_{\alpha\beta}(x). \tag{3}$$

Подчеркнутые греческие индексы (локальные) так же, как и неподчеркнутые (мировые), принимают значения 0, 1, 2, 3, но отличаются правилами преобразования при преобразованиях мировых и локальных координат. Подчеркнутые индексы не реагируют на преобразования мировых координат, а неподчеркнутые — на преобразования координат в касательных плоских пространствах. В дальнейшем для простоты будем полагать, что во всех касательных пространствах выбраны декартовы координаты, так что тензор  $\eta_{uv}$  имеет вид

$$\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(-1,1,1,1).$$
(4)

Поднятие и опускание мировых индексов у реперных векторов производится с помощью мирового метрического тензора, а локальных индексов - с помощью локального метрического тензора.

Наряду с мировыми ДМ  $\gamma_{\alpha}(x)$  всегда могут быть введены ДМ еще одного типа — не зависящие от координат локальные ДМ  $\gamma_{\underline{\alpha}}$ . Локальные ДМ вводятся с помощью соотношения, аналогичного (1), т. е. соотношения

$$\gamma_{\mu}\gamma_{\nu} + \gamma_{\nu}\gamma_{\mu} = 2\eta_{\mu\nu}E_{4\times4}.\tag{5}$$

Характер преобразования матричных индексов у локальных ДМ определяется требованием их неизменности при локальных лоренцевых преобразованиях. При таких преобразованиях величины  $\gamma_{\alpha}$  испытывают следующие преобразования:

$$\gamma_{\underline{\alpha}} \to w_{\underline{\alpha}}{}^{\underline{\beta}} \left( L^{-1} \gamma_{\underline{\beta}} L \right).$$
 (6)

Здесь  $w_{\underline{\alpha}}^{\ \beta}$  – объекты, определяющие лоренцевы преобразования векторов в касательном плоском пространстве. Эти объекты удовлетворяют соотношениям

$$w_{\underline{\alpha}}{}^{\underline{\mu}}w_{\underline{\beta}}{}^{\underline{\nu}}\eta_{\underline{\mu}\underline{\nu}} = \eta_{\underline{\alpha}\underline{\beta}}.\tag{7}$$

Матрицы L в (6) определяются из условия неизменности  $\gamma_{\underline{\alpha}}$  при лоренцевых преобразованиях, т. е. из условия

$$\left(L\gamma_{\underline{\alpha}}L^{-1}\right) = w_{\underline{\alpha}}{}^{\underline{\beta}}\gamma_{\underline{\beta}}.\tag{8}$$

Как ДМ  $\gamma_{\alpha}(x)$ , так и ДМ  $H_{\alpha}^{\mu}(x)\gamma_{\underline{\mu}}$  удовлетворяют одному и тому же соотношению (1). Поэтому по известной теореме Паули они должны быть связаны соотношением

$$\gamma_{\alpha}(x) = H_{\alpha}^{\mu}(x)R(x)\gamma_{\mu}R^{-1}(x). \tag{9}$$

#### ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

В этом соотношении матрица. R(x). является неособенной и обладает смешанным типом матричных индексов: левый индекс у матрицы R имеет мировую природу, а правый – локальную. Это свойство индексов матрицы R(x) аналогично свойству индексов реперных векторов  $H^{\mu}_{\overline{\alpha}}(x)$ , поэтому R(x) будем называть реперной матрицей.

В качестве матриц  $\gamma_{\underline{\alpha}}$  можно во всех точках риманова пространства выбрать одну и ту же систему, например систему

$$\gamma_0 = -i\rho_2\sigma_1, \quad \gamma_1 = \rho_1, \quad \gamma_2 = \rho_2\sigma_2, \quad \gamma_3 = \rho_3. \tag{10}$$

На основе ДМ (10) может быть построена полная система из 16 вещественных матриц 4×4.

#### 3. Дискретные автоморфизмы

Если найдена система ДМ  $\gamma_{\alpha}$ , удовлетворяющая уравнениям (1), то этим же уравнениям удовлетворяет и система  $\gamma_{\alpha}^{T}$ , получаемая из  $\gamma_{\alpha}$  путем транспонирования, а также  $-\gamma_{\alpha}^{T}$ ,  $-\gamma_{\alpha}$ . Известно, что всегда существуют неособенные матрицы, связывающие системы

$$\gamma_{\alpha}, -\gamma_{\alpha}, -\gamma_{\alpha}^{T}, \gamma_{\alpha}^{T}. \tag{11}$$

Введем обозначения для этих матриц:

$$-\gamma_{\alpha} = I\gamma_{\alpha}I^{-1}, \quad -\gamma_{\alpha}^{T} = D\gamma_{\alpha}D^{-1}, \quad \gamma_{\alpha}^{T} = C\gamma_{\alpha}C^{-1}. \tag{12}$$

Известно, что матрицы D, C антисимметричны,

$$D^T = -D, \quad C^T = -C, \tag{13}$$

а матрица I кратна  $\gamma_5 \equiv \gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3$ . На основе матриц D, C могут быть построены полные системы 16 матриц  $4\times 4$ , каждая из которых обладает свойством либо симметричности, либо антисимметричности. Так, построенная с помощью матрицы C полная система 16 матриц  $4\times 4$  состоит из 6 антисимметричных матриц C,  $C\gamma_\alpha$ ,  $C\gamma_5$  и 10 эрмитовых матриц  $C\gamma_5\gamma_\alpha$ ,  $CS_{\alpha\beta}$ .

Здесь 
$$S_{\alpha\beta} = (1/2)(\gamma_{\alpha}\gamma_{\beta} - \gamma_{\beta}\gamma_{\alpha}).$$

Еще один дискретный автоморфизм ДМ состоит в замене матриц  $\rho_k$  на  $\sigma_k$  и наоборот. Введем матрицу H, удовлетворяющую условиям

$$H\rho_{\nu}H^{-1} = \sigma_{\nu}, \quad H\sigma_{\nu}H^{-1} = \rho_{\nu}, \quad k = 1, 2, 3.$$
 (14)

Матрица, удовлетворяющая (14), определяется однозначно и имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \left( E + \rho_1 \sigma_1 + \rho_2 \sigma_2 + \rho_3 \sigma_3 \right). \tag{15}$$

В терминах ДМ (10) матрица (15) записывается как

$$H = \frac{1}{2} \left( E + \gamma_{\underline{0}} \gamma_{\underline{3}} + \gamma_{\underline{2}} + \gamma_{\underline{5}} \gamma_{\underline{1}} \right). \tag{16}$$

В явном виде

$$H = \begin{array}{c|c} 1 & & \\ \hline & 1 & \\ & & 1 \end{array}, \quad \det(H) = -1. \tag{17}$$

Матрица H является симметричной и удовлетворяет условию

$$H^2 = E. (18)$$

#### 4. Ковариантная производная и группа инвариантности

Общий вид ковариантной производной от ДМ с мировыми индексами (мировых ДМ) может быть найден, если продифференцировать исходное соотношение (1). Поскольку  $g_{\alpha\beta;\lambda}=0$ , то получаем

$$(\nabla_{\lambda} \gamma_{\alpha}) \gamma_{\beta} + \gamma_{\alpha} (\nabla_{\lambda} \gamma_{\beta}) + (\nabla_{\lambda} \gamma_{\beta}) \gamma_{\alpha} + \gamma_{\beta} (\nabla_{\lambda} \gamma_{\alpha}) = 0.$$
 (19)

Решением матричного уравнения (19) является

$$\nabla_{\alpha} \gamma^{\beta} = \gamma^{\beta}_{;\alpha} + \left[ \Gamma_{\alpha}, \gamma^{\beta} \right] . \tag{20}$$

Здесь  $\Gamma_{\alpha}$  — некоторые величины, преобразующиеся при координатных преобразованиях как векторы, но имеющие не числовые компоненты, а матричные. Часть  $\Gamma_{\alpha}$ , кратная единичной матрице, коммутирует со всеми ДМ, поэтому не влияет на ковариантные производные от ДМ с мировыми индексами. Символы  $\Gamma_{\alpha}$  аналогичны символам Кристоффеля, но относятся к пространству матричных степеней свободы ДМ. Соотношение (19) не накладывает никаких ограничений на  $\Gamma_{\alpha}$ . В частности, из этого соотношения не следует, что ковариантная производная от ДМ равна нулю, т. е., вообще говоря,

$$\nabla_{\alpha} \gamma^{\beta} \neq 0. \tag{21}$$

При параллельном переносе некоторого матричного поля Y(x) на малый вектор  $dx^{\mu}$  поле получает приращение  $dx^{\mu} \Big[ \Gamma_{\mu}, Y(x) \Big]_{-}$ . Если поле Y(x) было симметричным или антисимметричным, то при параллельном переносе и приращение должно быть симметричным или антисимметричным. Пусть  $Y^{T}(x) = Y(x)$ . Тогда должно выполняться соотношение

$$dx^{\mu} \left( \left[ \Gamma_{\mu}, Y(x) \right]_{-} \right)^{T} = dx^{\mu} \left[ \Gamma_{\mu}, Y(x) \right]_{-}. \tag{22}$$

Соотношение (22) может выполняться для любых полей Y(x) только в том случае, если величины  $\Gamma_{\alpha}$  представляют собой антисимметричные вещественные матрицы 4×4,

$$\Gamma_{\alpha}^{T} = -\Gamma_{\alpha}. \tag{23}$$

#### ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Из условия (23) следует, в частности, что

$$\nabla_{\alpha} \left( \gamma_{\beta}^{T} \right) = \left( \nabla_{\alpha} \gamma_{\beta} \right)^{T}. \tag{24}$$

При преобразованиях

$$\gamma_{\alpha}(x) \rightarrow \gamma_{\alpha}'(x) = S(x)\gamma_{\alpha}(x)S^{-1}(x)$$
 (25)

величины  $\Gamma_{\alpha}$  преобразуются по правилу

$$\Gamma_{\alpha} \to \Gamma_{\alpha}' = S\Gamma_{\alpha}S^{-1} + S\frac{\partial S^{-1}}{\partial x^{\alpha}}.$$
 (26)

Зададимся вопросом: какими свойствами должны обладать матрицы S, чтобы при преобразованиях (26) величины  $\Gamma_{\alpha}$  оставались антисимметричными, т. е. сохраняли свойство (23)? Из соотношения (26) следует, что свойство (23) может сохраняться только в том случае, если матрицы S будут ортогональными, т. е. если

$$S^T = S^{-1}. (27)$$

Таким образом, алгебраические соотношения (1) инвариантны относительно 15-параметрической группы вещественных неособенных матриц (25), а алгебраические соотношения, в которых содержатся дискретные автоморфизмы (11), а также ковариантные производные, инвариантны только по отношению к 6-параметрической группе ортогональных матриц (27). Группу ортогональных матриц будем обозначать как O(4) и считать эту группу группой инвариантных преобразований соотношений, содержащих ДМ и ковариантные производные от матричных полей. Сами инвариантные преобразования будем обозначать как T. Таким образом, при инвариантных T-преобразованиях величины  $\Gamma_{\alpha}$  преобразуются по правилу

$$\Gamma_{\alpha} \to \Gamma_{\alpha}' = T\Gamma_{\alpha}T^{-1} + T\frac{\partial T^{-1}}{\partial x^{\alpha}}$$
 (28)

и после преобразования остаются вещественными и антисимметричными. Перечисленные выше свойства величин  $\Gamma_{\alpha}$  показывают, что они являются по существу полями Янга – Миллса, построенными на группе O(4).

Выше отмечалось, что при параллельном переносе симметричного или антисимметричного объекта получаемая добавка также обладает этим же свойством. Кроме этого правила применительно к параллельному переносу будем предъявлять еще два правила:

- реперные векторы в точке A, параллельно переносимые в точку B, должны совпадать с теми реперными векторами, которые имеются в точке B;
- локальные ДМ  $\gamma_{\underline{\alpha}}$  в точке A, параллельно переносимые в точку B, должны совпадать с теми локальными ДМ, которые имеются в точке B. Из этих правил следует, что

$$\nabla_{\lambda} H^{\alpha}_{\mu} = 0, \tag{29}$$

$$\nabla_{\lambda} \gamma_{\alpha} = 0. \tag{30}$$

При параллельном переносе каждый индекс вносит вклад в изменение переносимой величины. С учетом этого, а также того, что по построению  $\gamma_{\alpha;\lambda}=0$ , записываем соотношения (29), (30) как

$$\nabla_{\lambda} H^{\alpha}_{\mu} = H^{\alpha}_{\mu;\lambda} - \Phi_{\lambda}^{\underline{\nu}}_{\mu} H^{\alpha}_{\underline{\nu}} = 0, \tag{31}$$

$$\nabla_{\lambda}\gamma_{\underline{\alpha}} = -\Phi_{\lambda}^{\underline{\beta}}_{\underline{\alpha}}\gamma_{\beta} + \left[\Phi_{\lambda}, \gamma_{\underline{\alpha}}\right] = 0. \tag{32}$$

Из соотношения (31) находим, что

$$\Phi_{\lambda}^{\mu}_{\nu} = H_{\sigma}^{\mu} H_{\nu;\lambda}^{\sigma},\tag{33}$$

а из соотношения (32)

$$\Phi_{\lambda} = \frac{1}{4} H_{\underline{\mu}\sigma} H_{\underline{\nu};\lambda}^{\sigma} S^{\underline{\mu}\underline{\nu}}. \tag{34}$$

Правила дифференцирования реперной матрицы имеют вид:

$$\nabla_{\lambda}R = R_{,\lambda} + \Gamma_{\lambda}R - R\Phi_{\lambda},$$

$$\nabla_{\lambda}R^{-1} = R^{-1}_{,\lambda} + \Phi_{\lambda}R^{-1} - R^{-1}\Gamma_{\lambda},$$

$$\nabla_{\lambda}R^{T} = R^{T}_{,\lambda} - \Phi^{T}_{\lambda}R^{T} - R^{T}\Gamma_{\lambda},$$

$$\nabla_{\lambda}R^{-1T} = R^{-1T}_{,\lambda} + R^{-1T}\Phi^{T}_{\lambda} + \Gamma_{\lambda}R^{-1T}.$$

$$(35)$$

#### 5. Вакуумные системы ДМ

#### 5.1. Определение вакуумной системы ДМ

Наличие дискретных автоморфизмов позволяет расширить возможности по образованию из ДМ и их ковариантных производных числовых скалярных функций. Примерами таких функций в случае 4-мерного риманова пространства и использования вещественных чисел для реализации ДМ являются

$$Tr\left(\gamma^{\alpha}\gamma_{\alpha}^{T}\right), Tr\left(\gamma^{\alpha}\left(S^{\mu\nu}\left(S_{\mu\nu}\right)^{T}\right)\gamma_{\alpha}^{T}\right),$$

$$Tr\left(S^{\alpha\beta}\left(\nabla_{\beta}\gamma_{\alpha}^{T}\right) + \left(S^{\alpha\beta}\right)^{T}\left(\nabla_{\beta}\gamma_{\alpha}\right)\right).$$
(36)

Однако среди систем ДМ имеются такие, из которых построить поля, зависящие от координат и отличные от целочисленных функций, оказывается в принципе невозможным. Из них можно построить только тривиальные поля, т. е. поля, компоненты которых сводятся к целым числам, постоянным по всему пространству. К числу таких систем ДМ, как нетрудно проверить, относятся ДМ, построенные в [8, 9] с помощью процедур удвоения и выхлопа. Такие системы ДМ будем называть вакуумными системами ДМ. Если найдена какая-то вакуумная система ДМ, то вакуумной будет и любая другая, получаемая из исходной с помощью инвариантного преобразования типа (25), в котором матрица *S* является ортогональной.

Некоторые из вакуумных ДМ имеют также отличительные особенности:

- записываются в виде одночленов в терминах матриц «ро» «сигма»;
- обладают определенными свойствами симметричности или антисимметричности;
- имеют в качестве элементов числа  $0, \pm 1$ .

#### ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Такие вакуумные ДМ будем называть вакуумными ДМ в ортонормированном кубическом базисе, а сам базис – базисом кубической решетки  $Z_4$ . Простейшим примером системы ДМ в ортонормированном кубическом базисе является майорановская система (10), которую в последующем будем обозначать как  $\underline{\gamma}_{\underline{\alpha}}$  (подчеркивается не только индекс, если он локальный, но и сам символ ДМ).

#### 5.2. Решетчатые вакуумные ДМ

В [10] приведен простейший пример вакуумной ДМ в 4-мерном римановом пространстве с сигнатурой (-+++), построенной не с использованием ортонормированного базиса, а с использованием косоугольного базиса автодуальной решетки  $D_4$ . Систему ДМ, построенную на косоугольном базисе решетки  $D_4$ , будем обозначать как  $\frac{\gamma}{=}$   $\underline{\alpha}$ . Система базисных векторов любой решетки задается с помощью так называемой порождающей матрицы M, т. е. матрицы, в строчках которой приводятся компоненты базисных векторов решетки в ортонормированном базисе. Ортонормированный базис имеет в качестве порождающей матрицы единичную матрицу. Порождающая матрица для решетки  $D_4$  имеет вид

$$M = 2^{-1/4} \begin{vmatrix} -1 & -1 & & & \\ 1 & -1 & & & \\ & 1 & -1 & & \\ & & 1 & -1 & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & \\ & & & & \\ &$$

Переход от базиса  $Z_4$  к базису  $D_4$  относится к категории преобразований типа (25), однако порождающая матрица (37), которая используется при этом преобразовании, не является ортогональной. И это, как будет видно далее, влечет за собой далеко идущие последствия.

Сделав преобразование

$$\underline{\gamma}_{\underline{\alpha}} \to \underline{\gamma}_{\underline{\alpha}} = M \underline{\gamma}_{\underline{\alpha}} M^{-1}, \tag{38}$$

где M — матрица (37), получим систему ДМ в базисе решетки  $D_4$ . Новые ДМ имеют следующий вид:

Приведенный пример иллюстрирует общее правило записи ДМ в базисе той или иной решетки. Все элементы ДМ (39) являются целочисленными, поэтому такие скалярные функции, как (36), в случае ДМ (39) также имеют целочисленные и постоянные по пространству значения.

Матрица  $\underline{D}$ , определяемая как

$$\underline{\underline{\underline{p}}}\underline{\underline{\gamma}}\underline{\underline{\alpha}}\underline{\underline{\underline{D}}}^{-1} = -\underline{\underline{\gamma}}\underline{\underline{\alpha}},\tag{40}$$

находится по формуле

$$\underline{\underline{\underline{D}}} = M^{-1T} \underline{\underline{D}} M^{-1} \tag{41}$$

и имеет вид

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & -1 & -2 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \quad \det \underline{\underline{D}} = 1.$$
(42)

Матрица (42) антисимметрична. Приведем явный вид еще двух матриц, которые нам понадобятся в последующем:  $\underline{\underline{D}}^2$  и  $\underline{\underline{D}}^4$ .

Легко проверить, что матрицы  $E,\ \underline{\underline{D}}^2$  и  $\underline{\underline{D}}^4$  связаны соотношением

$$\underline{\underline{D}}^4 = -\frac{1}{4}E - \frac{7}{4}\underline{\underline{D}}^2. \tag{44}$$

Собственные значения матрицы  $\underline{\underline{\underline{D}}}^2$  равны

$$\begin{cases}
\frac{1}{8}(-7 - \sqrt{33}), \frac{1}{8}(-7 + \sqrt{33}), \\
\frac{1}{8}(-7 - \sqrt{33}), \frac{1}{8}(-7 + \sqrt{33})
\end{cases}$$
(45)

Существует ортогональное преобразование, приводящее симметричную матрицу  $\underline{\underline{\mathcal{D}}}^2$  к диагональному виду. Это же преобразование приводит матрицу  $\left(\theta_1 E + \theta_2 \underline{\underline{\mathcal{D}}}^2\right)$  к виду

$$\frac{\left(\theta_{1}E + \theta_{2}\underline{\underline{D}}^{2}\right) \rightarrow}{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 - \sqrt{33}\right)}{8}}$$

$$\frac{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 + \sqrt{33}\right)}{8}}{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 - \sqrt{33}\right)}{8}}$$

$$\frac{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 - \sqrt{33}\right)}{8}}{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 + \sqrt{33}\right)}{8}}$$

$$\frac{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 + \sqrt{33}\right)}{8}}{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 + \sqrt{33}\right)}{8}}$$

$$\frac{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 + \sqrt{33}\right)}{8}}{\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 + \sqrt{33}\right)}{8}}$$

Далее нам понадобится представление матрицы (46) в виде суммы двух проекторов  $\frac{1}{2}(E\pm\sigma_3)$ . Это представление имеет вид

$$\left(\theta_{1}E + \theta_{2}\underline{\underline{D}}^{2}\right) \rightarrow \left(\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 - \sqrt{33}\right)}{8}\right) \frac{1}{2}\left(E + \sigma_{3}\right) + \left(\theta_{1} + \theta_{2}\frac{\left(-7 + \sqrt{33}\right)}{8}\right) \frac{1}{2}\left(E - \sigma_{3}\right). \tag{47}$$

#### 6. Динамические уравнения

#### 6.1. Волновая функция

Относительно волновой функции поля частиц со спином 1/2 сделаем два предположения. Во-первых, вслед за Зоммерфельдом [6] предположим, что она является матрицей той же матричной размерности, что и ДМ, т. е. матрицей  $4\times4$ . Во-вторых, волновую функцию будем отождествлять с матрицей, обратной к реперной матрице. Если волновую функцию обозначить Z, то второе предположение означает, что

$$Z = R^{-1}, (48)$$

где R — та матрица, которая входит в соотношение (9).

В последующем предполагаем, что система локальных ДМ  $\left\{\gamma_{\underline{\alpha}}\right\}$  совпадает с системой (10), т. е.  $\left\{\gamma_{\underline{\alpha}}\right\} = \left\{\underline{\gamma}_{\underline{\alpha}}\right\}$ , а риманово пространство является плоским. Если при этом рассматривается постоянное по пространству поле мировых ДМ  $\left\{\gamma_{\alpha}\right\}$  в майорановском представлении (10), то матрицы Z и  $R^{-1}$  равны единичной. Если поле мировых ДМ  $\left\{\gamma_{\alpha}\right\}$  совпадает с системой (39), то матрицы Z и  $R^{-1}$  равны матрице  $M^{-1}$  (37). При этом используются декартовы координаты и реперные векторы  $H^{\underline{\beta}}_{\underline{\alpha}} = \delta^{\underline{\beta}}_{\underline{\alpha}}$ .

#### 6.2. Лагранжиан

Лагранжиан берем в таком виде, чтобы он имел простейшую структуру и по конструкции был максимально близок к обычному лагранжиану для частиц со спином 1/2. Кроме того, чтобы он удовлетворял лоренцевой и O(4)-инвариантности и на всех возможных вакуумных системах ДМ был тождественно равным нулю. Одна из возможных конструкций лагранжиана может быть такой:

$$L = a \operatorname{Tr} \left\{ Z^{+} \underline{D} \left( H_{\underline{\varepsilon}}^{\alpha} \underline{\gamma}^{\underline{\varepsilon}} \right) (\nabla_{\alpha} Z) - (\nabla_{\alpha} Z^{+}) \underline{D} \left( H_{\underline{\varepsilon}}^{\alpha} \underline{\gamma}^{\underline{\varepsilon}} \right) Z \right\} +$$

$$+ \operatorname{Tr} \left\{ \sum_{m=0}^{9} \nu_{m} D^{2m} \right\} \operatorname{Tr} \left\{ \sum_{n=0}^{5} \theta_{n} D^{2n+1} \right\} + b \operatorname{Tr} \left\{ P_{\mu\nu} P^{\mu\nu} \right\}.$$

$$(49)$$

Лагранжиан (49) состоит из трех частей. Первая часть (с множителем a) содержит ковариантную производную от волновой функции

$$\nabla_{\lambda} Z = Z_{,\lambda} + \Phi_{\lambda} Z - Z \Gamma_{\lambda}. \tag{50}$$

Для обеспечения лоренцевой инвариантности этой части в ее конструкцию должны входить локальные матрицы  $\left(H_{\underline{\varepsilon}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\varepsilon}}\right)$ , а матрица  $\underline{D}$  должна удовлетворять соотношению  $\underline{D}\underline{\gamma}_{\underline{\alpha}}\underline{D}^{-1} = -\underline{\gamma}_{\underline{\alpha}}^{T}$ . Поскольку матрицы  $\underline{D}\underline{\gamma}_{\underline{\alpha}}$  симметричны, то под следом в первой части стоит антисимметричная вещественная матрица и, следовательно, след от нее тождественно равен нулю.

Вторая часть содержит произведение двух сомножителей. Первый сомножитель содержит сумму четных степеней  $D^{2m}$  матрицы  $D=Z^T \underline{D} Z$  с коэффициентами  $v_m$ , а второй – сумму нечетных степеней  $D^{2n+1}$  с коэффициентами  $\theta_n$ . Число слагаемых в первом сомножителе не может превышать 10 (числа независимых симметричных матриц 4×4), а во втором сомножителе – 6 (числа независимых антисимметричных матриц 4×4). Матрица D антисимметрична, поэтому второй сомножитель во второй части тождественно равен нулю (а вместе с ним и вся вторая часть). Будем также предполагать, что коэффициенты  $v_m$  в конструкции первого сомножителя во второй части подобраны так, чтобы на вакуумных системах (в частности, на  $Z_4$ ) этот сомножитель обращался в нуль, т. е.

$$\operatorname{Tr}\left\{\sum_{m=0}^{9} \mathbf{v}_m \cdot \underline{D}^{2m}\right\} = 0. \tag{51}$$

Третья часть содержит динамический член, связанный с величиной  $\Gamma_{\alpha}$ ; при этом  $P_{\alpha\beta}$  – тензор, определяемый как

$$P_{\alpha\beta} = \Gamma_{\beta,\alpha} - \Gamma_{\alpha,\beta} + \left[ \Gamma_{\alpha}, \Gamma_{\beta} \right] . \tag{52}$$

Тензор (52) является антисимметричным и построен по алгоритму, аналогичному тензору электромагнитного поля.

Обратим внимание на два обстоятельства. Во-первых, тождественное обращение в нуль первых двух частей лагранжиана на вакуумных системах ДМ не означает, что тождественно равны нулю и выражения, получаемые при варьировании волновой функции. Во-вторых, при построении лагранжиана никаких предположений относительно малости элементов волновой функции не делается. Более того, по построению волновая функция на вакууме  $Z_4$  равна единичной матрице, а на вакууме  $D_4$  равна матрице  $M^{-1}$  (37).

#### 6.3. Динамические уравнения

Динамические уравнения будем получать, считая независимыми величинами вариации  $\delta Z^T$ ,  $\delta Z$ ,  $\delta \Gamma_\alpha$ . С учетом этого динамические уравнения принимают следующий вид:

$$a\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}Z\right) + \operatorname{Tr}\left\{\sum_{m=0}^{9}\nu_{m}D^{2m}\right\}Z\left(\sum_{n=0}^{5}\left(2n+1\right)\theta_{n}D^{2n}\right) = 0.$$
 (53)

$$-a\left(\nabla_{\alpha}Z^{T}\right)\tilde{D}\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\gamma^{\underline{\mu}}\right) + \operatorname{Tr}\left\{\sum_{m=0}^{9} \nu_{m}D^{2m}\right\} \left(\sum_{n=0}^{5} (2n+1)\theta_{n}D^{2n}\right)Z^{T}\tilde{D} = 0.$$
 (54)

$$g^{\lambda\sigma}g^{\mu\nu}\left(\nabla_{\mu}P_{\sigma\nu}\right) = 0. \tag{55}$$

Уравнения (53), (54) являются аналогами уравнения Дирака и транспонированного к нему, а уравнение (55) — уравнением для свободного (без источников) поля матричной связности  $\Gamma_{\alpha}$ .

Заметим, что величины  $\Phi_{\alpha}$ , входящие в ковариантную производную (50), ответственны за взаимодействие частицы с заданным внешним гравитационным полем. Такое взаимодействие исследовалось во многих работах (см., например, [11]). В данной работе пространство считается плоским и эти взаимодействия не рассматриваются. Не рассматривается также тензор энергии-импульса, который входит в уравнения общей теории относительности.

#### 6.4. Динамика вакуумных систем ДМ

Общие уравнения (53)–(55) значительно упрощаются, если ограничиться задачей исследования динамики двух вакуумных систем ДМ:  $Z_4$  и  $D_4$ . На вакууме  $Z_4$  выполняется соотношение  $\underline{D}^2 = -E$ , а на вакууме  $D_4$  выполняется соотношение (44). Поэтому в уравнениях (53)–(55) можно ограничиться несколькими низшими степенями по матрице D (в нашем рассмотрении – не выше четвертой). В результате уравнение (53) принимает вид

$$\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}Z\right) + \operatorname{Tr}\left\{E + 2D^{2} + D^{4}\right\}Z\left(\theta_{1}E + 3\theta_{2}D^{2}\right) = 0.$$
(56)

Убедимся в том, что волновая функция Z = E, соответствующая вакууму  $Z_4$ , удовлетворяет уравнениям (55), (56). Мы не будем сейчас рассматривать свободные поля Янга — Миллса, для удовлетворения уравнения (55) положим

$$\Gamma_{\alpha} = 0. \tag{57}$$

После этого, положив в уравнении (56) Z = E, устанавливаем, что член с ковариантной производной в уравнении (53) тождественно обращается в нуль; обращается тождественно в нуль и алгебраический член в (56) в силу соотношения  $\underline{D}^2 = -E$ . Таким образом, волновая функция Z = Eвместе с выражением (57) для поля Янга – Миллса являются решением уравнений (56), (55).

Проделаем аналогичные выкладки для вакуумной системы ДМ  $D_4$ . Используем соотношения (43), (44) и (47). Приводим алгебраический член в (56) к виду:

$$\operatorname{Tr}\left\{E + 2\underline{\underline{D}}^{2} + \underline{\underline{D}}^{4}\right\} Z\left(\theta_{1}E + 3\theta_{2}\underline{\underline{D}}^{2}\right) = \frac{17}{8}Z \begin{cases} \left(\theta_{1} + \theta_{2}\frac{-7 - \sqrt{33}}{8}\right) \frac{1}{2}\left(E + \sigma_{3}\right) + \left(\theta_{1} + \theta_{2}\frac{-7 + \sqrt{33}}{8}\right) \frac{1}{2}\left(E - \sigma_{3}\right) + \left(\theta_{1} + \theta_{2}\frac{-7 + \sqrt{33}}{8}\right) \frac{1}{2}\left(E - \sigma_{3}\right) \end{cases}$$
(58)

Полученное выражение запишем в виде

$$\operatorname{Tr}\left\{E + 2\underline{\underline{D}}^{2} + \underline{\underline{D}}^{4}\right\} Z\left(\theta_{1}E + 3\theta_{2}\underline{\underline{D}}^{2}\right) = m_{1}Z\frac{1}{2}(E + \sigma_{3}) + m_{2}Z\frac{1}{2}(E - \sigma_{3}). \tag{59}$$

Здесь мы ввели обозначения

$$m_1 = \frac{17}{8} \left( \theta_1 + \theta_2 \frac{-7 - \sqrt{33}}{8} \right), \quad m_2 = \frac{17}{8} \left( \theta_1 + \theta_2 \frac{-7 + \sqrt{33}}{8} \right). \tag{60}$$

Таким образом, уравнение (56) для волновой функции, соответствующей вакуумной системе ДМ  $D_4$ , после умножения справа на проекторы

$$Q_{\pm} = \frac{1}{2} \left( E \pm \sigma_3 \right) \tag{61}$$

автоматически расщепляется на два уравнения:

$$\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}Z\right)\frac{1}{2}\left(E+\sigma_{3}\right)+m_{1}Z\frac{1}{2}\left(E+\sigma_{3}\right)=0,$$
(62)

$$\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}Z\right)\frac{1}{2}\left(E-\sigma_{3}\right)+m_{2}Z\frac{1}{2}\left(E-\sigma_{3}\right)=0.$$
(63)

Используя обозначения (61), записываем уравнения (62), (63) в виде

$$\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}\left(ZQ_{+}\right)\right) + m_{1}\left(ZQ_{+}\right) = 0. \tag{64}$$

$$\left(H_{\mu}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}\left(ZQ_{-}\right)\right)+m_{2}\left(ZQ_{-}\right)=0. \tag{65}$$

#### 7. Проекторы {3; 1}

Из матрицы Z могут быть выделены части, которые подчиняются уравнению Дирака независимо друг от друга. Подходящие проекторы для этой цели могут быть построены на основе матрицы H вида (15). Проекторы записываются как

$$P_{\pm} = \frac{1}{2} \left( E \pm H \right). \tag{66}$$

В явном виде

Ранг  $P_+$  равен 3, а ранг  $P_-$  равен 1. Удобно вместо матрицы (15) использовать другую матрицу – матрицу, равную

$$H' = \begin{array}{c|c} 1 & & & \\ \hline & 1 & & \\ \hline & -1 & \\ \hline & & 1 \end{array}, \quad \det(H') = -1. \tag{68}$$

Матрицы H,H' связаны ортогональным преобразованием

$$H' = WHW^{-1}, \tag{69}$$

где

$$W = \begin{array}{c|cccc} 1 & & & & \\ & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & \\ & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & \\ & & & 1 & \\ \end{array}$$
 (70)

После ортогонального преобразования проекторы (66) записываются как

$$P_{\pm} = \frac{1}{2} (E \pm H'). \tag{71}$$

В явном виде

Ранги проекторов  $P_{+}$  и  $P_{-}$  (штрих опускаем) по-прежнему равны 3 и 1.

Таким образом, без ограничения общности можно считать, что волновая функция автоматически расщепляется на две части:

$$Z = ZP_+ + ZP_-. (73)$$

Первая часть состоит из трех столбцовых биспиноров

$$ZP_{+} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|}\hline Z_{11} & Z_{12} & Z_{14} \\ \hline Z_{21} & Z_{22} & Z_{24} \\ \hline Z_{31} & Z_{32} & Z_{34} \\ \hline Z_{41} & Z_{42} & Z_{44} \\ \hline \end{array} . \tag{74}$$

Вторая часть состоит из одного биспинора

Подчеркнем, что такой результат получается на уровне поля вещественных чисел. Поскольку вещественные числа входят составной частью во все другие алгебры чисел, то разбиение биспинорной матрицы (73) всегда выполнимо и носит универсальный характер.

#### 8. Структура волновой функции, описывающей вакуумную систему ДМ $D_4$

Выясним физический смысл отдельных частей волновой функции, входящих в уравнения (64), (65). Из вида этих уравнений следует, что уравнение (64) описывает динамику частиц с массой  $m_1$ , а уравнение (65) описывает динамику частиц с массой  $m_2$ .

С точки зрения анализа физического смысла уравнений (64), (65) существенно то, что расщепление волновой функции на прямую сумму двух слагаемых

$$Z = ZQ_{\perp} \oplus ZQ_{-} \tag{76}$$

не является полным. Проекторы  $Q_{\pm}$  (61) и проекторы  $P_{\pm}$  (72) коммутируют между собой, поэтому расщепление волновой функции может быть произведено на 4 слагаемых:

$$Z = ZP_{+}Q_{+} \oplus ZP_{+}Q_{-} \oplus ZP_{-}Q_{+} \oplus ZP_{-}Q_{-}. \tag{77}$$

Поскольку выполняется тождество

$$PO = 0, (78)$$

то разложение (77) сводится к соотношению

$$Z = ZP_{+}Q_{+} \oplus ZP_{+}Q_{-} \oplus ZP_{-}Q_{+}. \tag{79}$$

Умножив уравнения (64), (65) справа на проекторы  $P_{\pm}$ ,  $Q_{\pm}$  и учтя (78), получим три уравнения:

$$\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}\left(ZP_{+}Q_{+}\right)\right) + m_{1}\left(ZP_{+}Q_{+}\right) = 0;$$
(80)

$$\left(H_{\mu}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}\left(ZP_{-}Q_{+}\right)\right)+m_{1}\left(ZP_{-}Q_{+}\right)=0;$$
(81)

$$\left(H_{\underline{\mu}}^{\alpha}\underline{\gamma}^{\underline{\mu}}\right)\left(\nabla_{\alpha}\left(ZP_{+}Q_{-}\right)\right) + m_{2}\left(ZP_{+}Q_{-}\right) = 0.$$
(82)

В уравнение (80) входит биспинор

а в уравнение (81) – биспинор

Каждый из этих биспиноров описывает частицу с массой  $m_1$ . В уравнение (82) входит биспинорный дублет

$$ZP_{+}Q_{-} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline Z_{12} & Z_{14} \\ \hline Z_{22} & Z_{24} \\ \hline Z_{32} & Z_{34} \\ \hline Z_{42} & Z_{44} \\ \hline \end{array}, \tag{85}$$

описывающий частицы с массой  $m_2$ .

Полученные результаты означают, что в области пространства, в которой ДМ представляют собой решеточные ДМ типа (39), волновая функция является суперпозицией двух синглетов с массой  $m_1$  и одного дублета с массой  $m_2$ . То есть мы получаем ту структуру поколения лептонов, о которой говорилось во Введении (атрибуты (1), (3)). В отличие от СМ рассматриваемый формализм не требует (но и не запрещает) обращения в нуль массы  $m_1$ . Стерильность биспинора  $ZP_-Q_+$  (атрибут (5)) обусловлена тем, что любые бинарные комбинации наблюдаемых величин с участием  $ZP_-Q_+$  и любого из состояний  $ZP_+Q_+$ ,  $ZP_+Q_-$  тождественно равны нулю из-за наличия рядом стоящих ортогональных проекторов  $P_-$  и  $P_+$ .

Полученные результаты, как следует из изложенного, не привнесены извне, а получены в рамках внутренней логики развиваемого подхода.

#### 9. Обсуждение

В работе исследован вопрос о том, какие биспинорные состояния возникают в случае, если:

- используется формализм вещественных матриц Дирака и вещественных волновых функций,
- волновые функции имеют вид не столбцовых биспиноров, а матриц, причем эти матрицы совпадают с обратными реперными матрицами,

- учитывается наличие не только дираковских матриц вакуумного типа в ортонормированном базисе  $Z_4$ , но и в базисе автодуальной решетки  $D_4$ .

Для инвариантного выделения из волновой функции биспинорных состояний в работе инвариантным образом введены нестандартные проекторы рангов 1 и 3. В конструкцию проекторов входит матрица, меняющая местами матрицы «ро» и «сигма». Введен лагранжиан, из которого могут быть получены динамические уравнения типа уравнения Дирака.

В результате проведенного исследования установлено, что волновая функция, описывающая поле ДМ в ортонормированном базисе  $Z_4$ , удовлетворяет динамическим уравнениям тривиальным образом. Ситуация с волновой функцией, описывающей поле ДМ в базисе решетки  $D_4$ , качественно иная. Это поле представляет собой прямую сумму двух биспинорных синглетов с массой  $m_1$  и одного биспинорного дублета с массой  $m_2$ . Механизм возникновения масс – и это принципиально – отличается от механизма Хиггса. Массы  $m_1$ ,  $m_2$  возникают потому, что существует система ДМ на решеточном базисе  $D_4$ , которая удовлетворяет динамическим уравнениям, но отличается от системы ДМ на ортонормированном базисе  $Z_4$ . Область пространства, в которой система ДМ построена на решеточном вакууме  $D_4$ , естественно отождествить с совокупностью состояний, принадлежащих электронному поколению лептонов.

Кинематические и динамические свойства состояний, описываемых волновой функцией поля ДМ в базисе решетки  $D_4$ , совпадают с теми атрибутами (1)—(5), которые перечислены во Введении и которые вводятся в СМ для всех поколений лептонов и кварков. Поэтому мы делаем вывод о том, что вещественные матрицы Дирака решетчатого типа и волновая функция, отождествляемая с обратной реперной матрицей, в наибольшей степени адаптированы к формализму СМ, поскольку уже на уровне кинематики воспроизводят многие из тех атрибутов СМ, которые в настоящее время вносятся в эту модель руками. Этот факт, по-видимому, можно рассматривать как указание на то направление совершенствования СМ, на котором она может быть доведена до уровня фундаментальной теории. При этом существенно, что результаты, полученные в рамках вещественных чисел, сохранятся при построении динамики поля частиц со спином 1/2 над любым другим более общим классом чисел. Рассмотренный в работе формализм допускает также обобщение на многомерные внутренние пространства.

Автор благодарит А. К. Хлебникова за обсуждения ряда проблем, связанных с тематикой работы.

#### Список литературы

- 1. Комминс Ю., Буксбаум Ф. Слабые взаимодействия лептонов и кварков. М.: Энергоатомиздат, 1987.
  - 2. Окунь Л. Б. Лептоны и кварки. М.: Наука, 1990.
- 3. Красников Н. В., Матвеев В. А. Новая физика на большом адронном коллайдере. М.: URSS, 2014.

#### ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

- 4. CMS Collaboration. Search for the standard model Higgs boson produced in association with a W or a Z boson and decaying to bottom quarks [Electronic resource]. http://arXiv:1310.3687 [hep-ex].
- 5. Горбатенко М. В. Биспиноры, порождаемые полем дираковских матриц в римановом пространстве // Теор. и матем. физика. 1995. Т. 103, № 1. С. 32.
  - 6. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Т. ІІ. М.: Гостехтеориздат, 1956.
- 7. Gorbatenko M. V., Pushkin A. V. Physical vacuum properties and internal space dimension // General Relativity and Gravitation. 2005. Vol. 37, No. 10. P. 1705 [http://arXiv: gr-qc/0409095].
- 8. Горбатенко М. В., Пушкин А. В. О соответствии между тензорами и биспинорами (ч. I) // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теор. и приклад. физика. 1999. Вып. 3. С. 3.
- 9. Горбатенко М. В., Пушкин А. В. О соответствии между тензорами и биспинорами (ч. II) // Там же. С. 19.
- 10. Горбатенко М. В. Частицы со спином 1/2 и 11-мерное риманово пространство // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теор. и приклад. физика. 2017. Вып. 2. С. 3–11.
- 11. Gorbatenko M. V., Neznamov V. P. Solution of the problem of uniqueness and hermiticity of hamiltonians for dirac particles in gravitational fields // Phys. Rev. 2010. Vol. D 82. P. 104056 [http://arXiv:1007.4631 [gr-qc]].

#### Dirac Matrices of the Lattice Type and the Standart Model Formalism

M. V. Gorbatenko

It is shown that real Dirac matrices and wave function identified as inverse reference matrix reproduce many attributes of Standart Model, which in present time are introduced in the model by hands, in adequately manner. At the same time, principal moments are an use of Dirac matrices of the lattice type and invariant projectors with a range 3.

#### СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 2

Шагалиев Р. М., Бутнев О. И., Глинский М. Л., Куваев А. А., Бахаев А. Н., Горев И. В., Журавлева М. В., Колесников С. С., Лысова Е. Н., Машенькин П. А., Пронин В. А., Семенов М. Е., Сидоров М. Л. Комплекс программ НИМФА. Методика решения задач нелинейной однофазной фильтрации и тепломассопереноса кидкости в пористых средах
Дьянов Д. Ю., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В., Наумова Е. И., Борляев В. В., Стародубов С. В., Шувалова Е. В., Медведкина М. В., Артемова Е. О., Челаков А. А., Казанцев А. В., Рябов А. А., Романов В. И., Куканов С. С. Такет программ ЛОГОС. Модуль решения динамических вадач прочности
Краюхин А. А., Янилкин Ю. В., Стадник А. Л., Егужова М. Ю. Метод расчета движения абсолютно твердого тела з упругопластической среде на неподвижной счетной сетке
Пазарев А. А., Полищук С. Н., Тихомиров Б. П. Нисленное решение двумерного уравнения лучистой геплопроводности методом сглаженных частиц
Залялов А. Н. Alias-метод для моделирования таблично заданных распределений случайных величин
Смолкина Д. Н., Борисенко О. Н., Черенкова М. В., Гиниятуллина А. Г., Кузьменко М. В., Чухманов Н. В., Потехин Е. В., Попова Н. В., Турусов М. Р. Автоматический генератор неструктурированных многогранных сеток в препроцессоре пакета программ ЛОГОС
Пазарев В. В. Распараллеливание и оптимизация построения блочных расчетных сеток в препроцессоре пакета программ ЛОГОС
В <i>оропинов А. А., Соколов С. С., Шмелёва А. К.</i> Построение трехмерной сетки на основе диаграммы Вороного в невыпуклых областях120
Георгиевская А. Б., Раевский В. А. Модель источника ударно-волнового пыления металлов, основанная на теории развития неустойчивости Рихтмайера – Мешкова138
Андреюк Н. А., Голубев А. И., Пятаков Н. П., Якутов Б. П. Результаты двумерного и трехмерного моделирования ускорения электронов в плазменной кильватерной волне
Гусарова Е. В., Селезенев А. А., Королев В. Ю. Расчет характеристик изотермического и ударно-волнового сжатия энергетических материалов методом молекулярной динамики172
Скляров А. В., Устимкин П. А., Селезенев А. А., Чевтаев С. А., Абрамов Н. А. Нисленное моделирование работы слэпперного детонатора на основе малочувствительного взрывчатого вещества

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 28 43

# Комплекс программ НИМФА. Методика решения задач нелинейной однофазной фильтрации и тепломассопереноса жидкости в пористых средах

Р. М. Шагалиев, О. И. Бутнев,

М. Л. Глинский\*, А. А. Куваев\*,

А. Н. Бахаев, И. В. Горев,

М. В. Журавлева, С. С. Колесников,

Е. Н. Лысова, П. А. Машенькин,

В. А. Пронин, М. Е. Семенов\*,

М. Л. Сидоров

Представлено описание программного комплекса НИМФА и методики решения задач нелинейной однофазной фильтрации жидкости и тепломассопереноса в пористых средах. Приведены основные уравнения моделируемых процессов и используемые сетки. Показано качественное и количественное согласие результатов на задачах с аналитическими решениями и задачах, рассчитанных с помощью других программных комплексов.

#### Введение

Важнейшей проблемой развития атомной промышленности России является обеспечение безопасного функционирования ее объектов. В этой связи становится актуальным получение достоверной информации о воздействии ядерно- и радиационно опасных объектов (ЯРОО) и хранилищ радиационно опасных отходов на грунты, грунтовые и поверхностные воды.

Основным методом, позволяющим получить количественные пространственно-временные характеристики воздействия ЯРОО на природные среды, и в частности на недра, является компьютерное моделирование процесса движения подземных вод (геофильтрации) и связанного с ним подземного массопереноса (геомиграции), выполняемое с использованием данных объектового мониторинга состояния недр.

<sup>©</sup> Вестник кибернетики. 2017. № 1(25). C. 58–66

<sup>\*</sup> ФГБУ «Гидроспецгеология», Москва

Математическое моделирование процессов миграции подземных вод требует специальных программных средств, позволяющих учесть широкий спектр физико-химических процессов и ориентированных на пользователя-гидрогеолога-геоэколога. В настоящее время в Российской Федерации математическое моделирование процессов подземного тепломассопереноса на практике осуществляется в основном с использованием импортных программных продуктов. Чаще всего для этой цели используются вычислительные программы семейства MODFLOW [1], SEAWAT [2] (разработчики – USGS, США) и программный комплекс TOUGH-2 [3] (разработчик – LBNL, США).

Работы по созданию инновационного отечественного программного комплекса (ПК) НИМФА [4] выполнялись с 2014 г. по программе, утвержденной в 2013 г. генеральным директором Госкорпорации «Росатом». В 2017 г. проведена аттестация ПК НИМФА в НТЦ ЯРБ (регистрационный № 419), а также разработана перспективная программа внедрения и использования ПК НИМФА в качестве отраслевого стандартного программного продукта для проведения геоэкологических расчетов по оценке воздействия ЯРОО на подземные воды, поверхностные воды и грунты.

#### Назначение комплекса программ НИМФА

Комплекс программ НИМФА предназначен для численного моделирования нестационарных трехмерных неизотермических геофильтрационных и геомиграционных потоков локального и регионального масштаба в напорных водоносных горизонтах, неоднородных по физическим свойствам.

Основными задачами численного моделирования по ПК НИМФА являются расчеты:

- полей напоров и скоростей геофильтрационного потока;
- траекторий геофильтрационного потока;
- ореолов химического и радиоактивного загрязнения, распространяющегося в геофильтрационном потоке от ЯРОО, а также от других потенциальных источников загрязнения подземных вод (свалок ТБО, промышленных водоемов-накопителей, полей фильтрации и т. д.).

При моделировании учитывается взаимодействие геофильтрационного и геомиграционного потоков с поверхностными водоемами и водотоками, а также (опосредованно) с атмосферными водными потоками (посредством задания на модели *инфильтрационного* питания (проникновение атмосферных и поверхностных вод в почву) и *эвапотранспирации* грунтовых вод (эффект испарения из почвы и с поверхности растительности).

Миграция растворенных радиоактивных и химических компонент (специй) рассматривается с учетом молекулярной диффузии, гидродинамической дисперсии, радиоактивного распада, а также задержки за счет обратимой сорбции на водовмещающих породах. При расчетах геофильтрации и геомиграции учитывается также плотностная дифференциация флюида в потоке, которая может быть обусловлена как тепловой, так и солевой конвекцией.

Программный комплекс НИМФА не включает непосредственно модели источников загрязнения. Последние учитываются при моделировании как граничные условия и источники-стоки геофильтрационного и геомиграционного потоков и требуют специального обоснования.

Модель мигрирующего раствора включает в себя множество компонентов. Подверженность радиоактивному распаду, сорбции, диффузии и влияние на плотность и вязкость раствора задается для конкретных компонентов. Программа учитывает неоднородность водной системы по всем фильтрационно-емкостным параметрам и по тензору дисперсии.

#### Математическая формулировка трехмерной модели

#### Модель напорной фильтрации

Модель напорной фильтрации подземных вод в пористой среде описывается следующей системой уравнений:

- закон сохранения массы

$$\frac{\partial (m\rho)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \overline{v}) = q,\tag{1}$$

- закон Дарси, связывающий скорость фильтрации с перепадом давлений:

$$\overline{v} = -\frac{K}{\mu} (\operatorname{grad} P - \rho \overline{g}), \tag{2}$$

где m — пористость,  $\rho$  — плотность флюида, t — время, q — массовый источник флюида,  $\overline{v}$  — скорость фильтрации, K — тензор (3×3) абсолютной проницаемости породы,  $\mu$  — динамическая вязкость флюида, P — давление,  $\overline{g}$  — вектор ускорения свободного падения.

#### Модель миграции

Для учета переноса примесей подземными водами необходимо дополнить систему (1), (2) законом сохранения массы каждого компонента раствора:

$$\frac{\partial (mC)}{\partial t} + \operatorname{div}(\overline{v}C - (D + ID_m)\operatorname{grad}C) = q_C + W_s, \tag{3}$$

где C — концентрация вещества, D — тензор (3×3) суммарной дисперсии, I — единичный тензор (3×3),  $D_m$  — коэффициент молекулярной диффузии,  $q_C$  — массовый источник концентрации,  $W_s$  — объемная интенсивность источников поглощения/выделения вещества.

#### Модель теплопроводности

Для учета тепловых эффектов к системе уравнений (1)–(3) необходимо добавить уравнение переноса тепла:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \left[ m \rho C_P + (1 - m) \rho_S C_S \right] T \right) + \operatorname{div} \left( \rho \overline{\nu} C_P T - \chi \nabla T \right) = q_T, \tag{4}$$

где  $C_S$ ,  $C_P$  – удельная теплоемкость породы и флюида соответственно,  $\rho_S$  – плотность породы, T – температура,  $\chi$  – суммарная теплопроводность,  $q_T$  – источник тепла.

В комплексе НИМФА применяется модель распространения тепла, в которой температура флюида и температура *скелета породы* (твердой части пористой среды) равны и выравнивание температуры между флюидом и скелетом пренебрежимо мало по сравнению с характерным временем фильтрации.

#### Модель распада и сорбции

Распад и мгновенная сорбция описываются следующими уравнениями:

$$W_{s} = -\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} - \lambda_{1} mC - \lambda_{2} \overline{C}, \ \overline{C} = \rho_{b} f(C),$$

где f(C) – изотерма сорбции (зависимость количества адсорбированного вещества в концентрации раствора при постоянной температуре),  $\overline{C}$  – концентрация вещества на породе (в единичном объеме),  $\rho_b$  – плотность породы,  $\lambda_1$  – константа распада для растворенной фазы,  $\lambda_2$  – константа распада для твердой фазы.

В комплексе НИМФА реализованы следующие виды изотерм:

$$f(C) = K_d C$$
 – изотерма Генри;

$$f(C) = K_f C^{\alpha}$$
 – изотерма Фрейндлиха;

$$f\left(C\right) = \frac{K_{l}\overline{S}C}{1+K_{l}C}$$
 — изотерма Лэнгмюра,

где  $K_d$ ,  $K_f$ ,  $K_l$  — коэффициенты фазового распределения,  $\alpha$  — показатель степени в изотерме Фрейндлиха,  $\overline{S}$  — сорбционная емкость породы.

Учитывая, что производную  $\frac{\partial \overline{C}}{\partial t}$  можно представить в виде  $\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{C}}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t}$ , в уравнении (3) вклад сорбции в  $W_s$  будет:

$$\begin{split} W_s &= -K_d \rho_b \, \frac{\partial C}{\partial t} \, - \text{для изотермы Генри;} \\ W_s &= -K_f \rho_b \alpha C^{\alpha-1} \, \frac{\partial C}{\partial t} \, - \text{для изотермы Фрейндлиха;} \\ W_s &= -\frac{K_l \rho_b \overline{S}}{\left(1 + K_l C\right)^2} \, \frac{\partial C}{\partial t} \, - \text{для изотермы Лэнгмюра.} \end{split}$$

Перенеся  $W_s$  в левую часть уравнения (3), получим уравнение для фактора замедления R:

$$\frac{\partial mC}{\partial t} + W_s = m \left( 1 + \frac{\partial \overline{C}}{\partial t} \right) \frac{\partial C}{\partial t} = mR \frac{\partial C}{\partial t},$$

где

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{m}$$
 – для изотермы Генри,

$$R = 1 + \frac{K_f \rho_b}{m} C^{\alpha - 1}$$
 — для изотермы Фрейндлиха,

$$R = 1 + \frac{K_l \rho_b \overline{S}}{m} \frac{1}{\left(1 + K_l C\right)^2} -$$
для изотермы Лэнгмюра.

#### Модель плотностной конвекции

Учет распространения различных веществ в недрах, как и учет распространения тепла, может по-разному влиять на динамику подземных вод. Случаи, когда состав воды и ее температура не влияют на динамические характеристики, являются самыми простыми. Уравнение состояния для данной математической модели очевидно:  $\rho = \text{const}$ ,  $\mu = \text{const}$ . Часто встречаются случаи, когда плотность меняется в зависимости от концентрации вещества и температуры флюида. Плотность в данном случае описывается зависимостью  $\rho = \rho(P, C, T)$ ; вязкость описывается зависимостью  $\mu = \mu(C, T)$ . В этом случае становится необходимым решать систему (1)-(4) совместно.

#### Начальные условия

Начальные условия по умолчанию задаются в виде

$$H(x, y, z, t = 0) = H_0(x, y, z); C_i(x, y, z, t = 0) = C_{i0}(x, y, z); T(x, y, z, t = 0) = T_0(x, y, z),$$

где H — пьезометрический напор пресной воды (высота столба жидкости в породе),  $C_i$  — концентрация i-го вещества, T — температура. По умолчанию  $C_{i0}(x,y,z)=0$ ,  $T_0(x,y,z)=0$ ,  $H_0(x,y,z)$  вычисляется по z координатам центров ячеек. Так как уравнения (1), (2) записаны относительно давления, то напор пресной воды в каждой ячейке переводится в давление по формуле  $P=(H-z)_f \, \rho_f \, g$ .

#### Граничные условия

Граничные условия могут задаваться на частях граничной поверхности области моделирования (кровля, подошва, боковая поверхность). Это условия 1-го, 2-го, 3-го рода, зависящие от координат и времени. По умолчанию на всех границах и для всех моделируемых процессов задано условие 2-го рода — производная по нормали от величины равна нулю, т. е. для процесса филь-  $\partial H$ 

трации 
$$\frac{\partial H}{\partial n} = 0$$
, для процесса миграции  $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$ , для процесса теплопроводности  $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$ .

Следует особо отметить, что при моделировании конвективного переноса в отсутствии диффузии/дисперсии на границах, через которые поток направлен внутрь области, необходимо задание концентраций (в данном случае, если концентрация не задана, то она берется равной нулю). Если поток выходит из области, то задавать концентрацию на границе области не требуется.

#### Внутренние условия

На границах между ячейками имеет место непрерывность давления, концентрации/активности и нормальных компонент потоков этих величин. Дополнительно на внутренних гранях ячеек может быть задано внутреннее граничное условие (например, таким граничным условием может выступать горизонтальный фильтрационный барьер, определяющий дополнительное фильтрационное сопротивление между соответствующими гранями, обусловленное наличием линейных слабопроницаемых зон в водовмещающих отложениях).

Для горизонтального барьера следует особо оговориться, что он лишь задает коэффициент абсолютной проницаемости на грани.

#### Уравнения состояния

В комплексе программ НИМФА реализованы следующие уравнения состояния.

- зависимость пористости от давления:

$$m(P) = m_0 + \beta(P - P_0),$$

где  $\beta$  — сжимаемость породы,  $m_0$  — пористость при давлении  $P_0$ . Пористость не допускается нулевой и ограничивается снизу параметром  $m_{\rm thresh}$ ;

- зависимость плотности от давления, температуры и концентраций веществ:

$$\rho(P,T,\overline{C}) = \rho_0 + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial \rho}{\partial C}\right)^i \left(C^i - C_0^i\right) + \frac{\partial \rho}{\partial T} \left(T - T_0\right) + \frac{\partial \rho}{P} \left(P - P_0\right),$$

где  $C_0^i$  — опорная концентрация, при которой отсутствует влияние i-го компонента примеси на плотность вещества;  $\left(\frac{\partial \rho}{\partial C}\right)^i$  — константа, характеризующая изменение плотности от концентрации i-го компонента вещества;  $\frac{\partial \rho}{\partial T}$  и  $\frac{\partial \rho}{\partial P}$  — константы, характеризующие изменение плотности от температуры и давления;

- зависимость вязкости от температуры и концентраций веществ:

$$\mu(T, \overline{C}) = \mu_T(T) + \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)^i \left(C^i - C_0^i\right),$$

где  $\left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)^i$  — константа, характеризующая изменение вязкости от концентрации i-го компонента вещества.

Для зависимости вязкости от температуры  $\mu_T(T)$  реализованы четыре различных формулы (табл. 1).

Таблица 1 Формулы зависимости вязкости от температуры

Виды $\mu_T(T)$	Константы	Примечание
$\mu_0 + \frac{\partial \mu}{\partial T} (T - T_0)$	$\frac{\partial \mu}{\partial T}$ характеризует изменение вязкости от температуры	Для моделирования слабоменяющейся вязкости воды
$A_0 A_1 \left(\frac{A_2}{T + A_3}\right)$	$A_0 = 2,394e - 5;$ $A_1 = 10; A_2 = 248,37;$ $A_3 = 133,15$	Для моделирования вязкости воды
$A_0 \left( A_1 + A_2 \left( T + A_3 \right) \right)^{A_4}$	$A_0 = 1e - 3;$ $A_1 = 1; A_2 = 1,5512e - 2;$ $A_3 = -20$ $A_4 = -1,572$	
$A_0T^{A_1}$	$A_0 = 0.168; A_1 = -1.0868;$	Для моделирования вязкости нефти

#### Источники/стоки

В программном комплексе НИМФА реализованы следующие модели источников/стоков: скважины, реки, линейные/площадные дрены, водоемы, инфильтрация, эвапотранспирация.

#### Дискретизация уравнений

#### Аппроксимация уравнения фильтрации

Подставляя (2) в (1) и интегрируя полученное уравнение по объему ячейки  $\Delta V$  с использованием формулы Гаусса – Остроградского, получаем следующий разностный аналог:

$$\frac{\left(m\rho\right)^{n+1}-\left(m\rho\right)^{n}}{\Delta t}\Delta V-\sum_{f=1}^{N_{f}}\left\{\left(\rho\frac{K}{\mu}\right)^{n+1}\left\{\mathrm{grad}\left(P^{n+1}\right)-\rho\overline{g}\right\}\right\}_{f}\overline{n_{f}}\Delta S_{f}=Q_{\Phi},$$

где  $Q_{\Phi} = q \Delta V$  — приток массы флюида в ячейку за единицу времени; суммирование ведется по граням ячейки;  $\overline{n_f}$  — нормаль к грани;  $\Delta S_f$  — площадь грани.

Проведем линеаризацию и будем искать решение на последующем шаге последовательностью итерационных шагов:

$$\begin{split} \frac{\left(m\rho\right)^{\gamma+1} - \left(m\rho\right)^{n}}{\Delta t} \Delta V - \sum_{f=1}^{N_{f}} \Lambda_{f}^{\Phi} \left(P^{\gamma+1}\right) = Q_{\Phi}, \\ \left(m\rho\right)^{\gamma+1} = \left(m\rho\right)^{\gamma} + \left(\frac{\partial \left(m\rho\right)}{\partial P}\right)^{\gamma} \Delta P, \\ \Delta P = P^{\gamma+1} - P^{\gamma} \end{split}$$

Введем обозначение оператора  $\Lambda_f^{\phi}$ , коэффициент при градиенте будем брать с  $\gamma$ -слоя:

$$\Lambda_{f}^{\Phi}\left(P^{\gamma+1}\right) = \left\{ \left(\rho \frac{\mathbf{K}}{\mu}\right)^{\gamma} \left\{ \operatorname{grad}\left(P^{\gamma} + \Delta P\right) - \rho \overline{g} \right\} \right\}_{f} \overline{n_{f}} \Delta S_{f},$$

$$\Lambda_{f}^{\Phi}\left(P^{\gamma+1}\right) = \Lambda_{f}^{\Phi E}\left(P^{\gamma}\right) + \Lambda_{f}^{\Phi I}\left(\Delta P\right),$$

$$\Lambda_{f}^{\Phi I}\left(\Delta P\right) = \left\{ \left(\rho \frac{\mathbf{K}}{\mu}\right)^{\gamma} \left\{ \operatorname{grad} \Delta P \right\} \right\} \overline{n_{f}} \Delta S_{f},$$

где

$$\Lambda_f^{\Phi E} \left( P^{\gamma} \right) = \left\{ \left( \rho \frac{\mathbf{K}}{\mu} \right)^{\gamma} \left\{ \operatorname{grad} P^{\gamma} - \rho \overline{g} \right\} \right\}_f \overline{n_f} \Delta S_f,$$

 $\Lambda_f^{\Phi}$  — разностный оператор, аппроксимирующий поток через грань,  $\overline{n_f}$  — нормаль к грани,  $\Delta S_f$  — площадь грани ячейки,  $\gamma$  — номер итерации.

Окончательно разностное уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{\left(\frac{\partial \left(m\rho\right)}{\partial P}\right)^{\gamma} \Delta P}{\Delta t} \Delta V - \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{\phi I} \left(\Delta P\right) = Q_{\phi} + \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{\phi E} \left(P^{\gamma}\right) - \left(\frac{\left(m\rho\right)^{\gamma} - \left(m\rho\right)^n}{\Delta t} \Delta V\right).$$

Из уравнения видно, что в правой части вычисляется сумма потока от источника и отрицательной невязки исходного уравнения. В стационарном случае разностная схема выглядит так:

$$\frac{\Delta P}{\omega} \Delta V - \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{\phi I} \left( \Delta P \right) = Q_{\phi} + \sum_{f=1}^{N_f} \Lambda_f^{\phi E} \left( P^{\gamma} \right),$$

где ω – релаксационный параметр схемы.

Аппроксимация явного  $\Lambda_f^{\Phi E}(P^{\gamma})$  и неявного  $\Lambda_f^{\Phi I}(\Delta P)$  оператора диффузионного потока производится с помощью метода отложенной коррекции [4].

#### Аппроксимация скорости фильтрации

Вектор скорости фильтрации в центре ячейки восстанавливается с помощью метода наименьших квадратов или интегрированием по объему ячейки массовых потоков.

#### Аппроксимация уравнений переноса концентрации и тепла

Уравнения для расчета переноса концентрации (3) и температуры (4) содержат, помимо диффузионного, конвективный член. Схемы для этих уравнений строятся аналогично как для миграции, так и для теплопереноса, поэтому ограничимся описанием построения схемы для уравнения миграции:

$$R^{n}m\frac{C^{n+1}-C^{n}}{\Delta t}\Delta V - \left(\sigma\sum_{f=1}^{N_{f}}\Lambda_{f}^{M}\left(C^{n+1}\right) + \left(1-\sigma\right)\sum_{f=1}^{N_{f}}\Lambda_{f}^{M}\left(C^{n}\right)\right) = Q_{M},$$

где  $\sigma$  – вес схемы ( $\sigma$  = 1 – неявная,  $\sigma$  = 0 – явная,  $\sigma$  = 0,5 – схема типа Кранка – Николсона). Проведем преобразования аналогично уравнению фильтрации и получим

$$\frac{R^{n}m\Delta C}{\Delta t}\Delta V - \sigma\sum\nolimits_{f=1}^{N_{f}}\Lambda_{f}^{\mathrm{M}}\left(\Delta C\right) = Q_{\mathrm{M}} + \sigma\sum\nolimits_{f=1}^{N_{f}}\Lambda_{f}^{\mathrm{M}}\left(C^{\gamma}\right) + \left(1-\sigma\right)\sum\nolimits_{f=1}^{N_{f}}\Lambda_{f}^{\mathrm{M}}\left(C^{n}\right) - \left(\frac{\left(mC\right)^{\gamma} - \left(mC\right)^{n}}{\Delta t}\Delta V\right),$$

где  $\Delta C = C^{\gamma+1} - C^{\gamma}$ .

Оператор  $\Lambda_f^{\text{M}}$  определяется несколько иначе, чем оператор потока в фильтрации; в них входит конвективный член:

$$\Lambda_f^{\mathrm{M}} \left( C^{\gamma} \right) = \left( \left( V_n C \right)_f - \left( \mathbf{D} \operatorname{grad} C \cdot \overline{n} \right)_f \right) \Delta S_f,$$

$$\Lambda_f^{\mathrm{M}} \left( \Delta C \right) = \left( \left( V_n \Delta C \right)_f - \left( \mathbf{D} \operatorname{grad} \Delta C \cdot \overline{n} \right)_f \right) \Delta S_f.$$

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Диффузионная часть  $(D\operatorname{grad}\Delta C\cdot \overline{n})_f$  аппроксимируется по методу отложенной коррекции, а для аппроксимации конвективного слагаемого  $(V_n\Delta C)_f$  используется TVD схема [2] с различными видами ограничителей.

# Методы решения

# Решение конечно-объемных уравнений

Основная идея метода решения рассмотренной выше системы определяющих уравнений – расщепление по процессам фильтрации, массопереноса и теплопроводности во взаимодействующих напорных водоносных и разделяющих пластах. Основными величинами, рассчитываемыми методом конечных объемов, являются поля давления, концентрации примесей и температуры в больших многослойных гидрогеологических системах. Время моделирования процессов зависит от задачи (сутки, сотни лет, сотни тысяч лет и т. д.). Исходные дифференциальные уравнения являются нелинейными. Они могут быть связаны между собой через скорость фильтрации, плотность и вязкость жидкости. Также учитывается зависимость пористости пород от давления.

Неизвестные величины, определяемые в процессе счета, приведены в табл. 2.

Таблица 2

Обозначение	Физический смысл	Размерность	
Н	Напор подземных вод (приведенный относительно чистой воды)	M	
$C_{i}$	Концентрация і-го мигранта в поровом растворе	г/л	
T	Температура подземных вод	К	
ρ	Плотность порового раствора	г/л	
$\overline{v}$	Вектор скорости фильтрации	м/сут.	

Неизвестные величины

Алгоритм решения системы основных уравнений основан на линеаризации системы конечно-объемных уравнений и последовательном решении соответствующего уравнения для каждого процесса и компонент отдельно друг от друга (метод SEQ). Линеаризация системы конечно-объемных уравнений производится относительно давления, концентраций и температуры. При этом в процессе счета образуются распределенные разреженные матрицы порядка  $N+N_{\rm wells}$  для фильтрации, N для миграции и N для теплопроводности (N – число ячеек сетки,  $N_{\rm wells}$  – число скважин). Система линейных алгебраических уравнений решается в параллельном режиме методами, реализованными в библиотеки LParSol [5], разработанной в ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ».

# Дискретизация периода моделирования

Весь период моделирования представляет собой объединение нескольких временных периодов разной длины, на каждом из которых реализуется различный режим «работы» гидрологических объектов. Такие периоды называются cmpecc-nepuodamu. (Например, на одном стресспериоде скважина может быть нагнетательной, на другом – добывающей. Другой пример – сезонные явления, например осадки или пересыхание рек). Каждый период разбивается пользователем на K фильтрационных шагов. Число миграционных шагов внутри каждого фильтрационного шага может варьироваться. Рассчитываемая однофазная фильтрация внутри одного стресс-периода

может быть как стационарной, так и нестационарной. Временные таблицы в источниках, граничных условиях не имеют в общем случае привязки к таблице стресс-периодов.

# Автоматический выбор шага по времени

Весовая схема для решения уравнений массопереноса при  $\sigma < 1/2$  является условно устойчивой. Условия устойчивости схемы формулируются следующим образом: объем вещества, переносимый за единицу времени в ячейку, не превышает объема самой ячейки. Данное условие является условием устойчивости по Куранту. Это условие формулируется как для внутренних потоков между ячейками, так и для источников/стоков. На основании данного условия выбирается шаг по времени для решения уравнения тепломассопереноса явным или неявным методом. Следует отметить, что при наличии процессов дисперсии и диффузии всегда используется неявная схема расчета и шаг по времени не ограничивается в программе (так как схема абсолютно устойчива).

# Верификация программного комплекса НИМФА

Для тестирования программного комплекса НИМФА применялись как задачи с аналитическим решением, так и без него, но численно исследованные ранее с помощью известных программных комплексов [1-3], рассматриваемых как стандартные. Для комплекса НИМФА была разработана матрица верификации в виде набора из 21 теста. В тестовых задачах присутствуют такие процессы, как фильтрация (стационарная и нестационарная), адвекция, дисперсия, диффузия, переменная плотность от времени, сорбция, радиоактивный распад и теплопроводность.

Для дискретизации области использовались различные виды плановых сеток: регулярная четырехугольная (рис. 1,a), неструктурированная треугольная (рис.  $1,\delta$ ), неструктурированная многоугольная (рис.  $1,\epsilon$ ), неструктурированная из треугольников и четырехугольников (рис.  $1,\epsilon$ ). Вдоль оси OZ применялась экструзия плановых сеток на 1 слой (если не оговаривается иное).

Построение сеточной модели рассчитываемого объекта производится с помощью запатентованного генератора (патент РФ на изобретение № 2611892) неструктурированных сеток для плас-товых объектов. Алгоритмы построения сетки изложены в работе [6]. Отличительной особенностью генератора является возможность построения неструктурированной сетки в параллельном режиме в модели распределенной памяти. Такой подход позволяет быстро строить сетки с количеством ячеек до нескольких миллиардов. Финальная сетка является распределенной (в виде параобластей) с перекрытием ячеек на один слой. Возможность построения неструктурированных сеток с таким количеством ячеек позволяет рассчитывать на супер-ЭВМ не только локальные, но и региональные модели территорий с детальной дискретизацией интересующих объектов.

Сравнение результатов тестов с аналитическим решением проводилось в виде относительной погрешности  $L_1$ , рассчитываемой по формуле

$$L_{1} = \frac{\sum_{i} \left| f_{i}^{\text{analit}} - f_{i}^{\text{calc}} \right|}{\sum_{i} \left| f_{i}^{\text{analit}} \right|} \cdot 100 \%,$$

где суммирование проводится по всем ячейкам области.

Расчеты задач из матрицы верификации показывают, что отклонение численного решения в задачах с аналитическим решением в основном не превышает 2 %. В одном из тестов отклонение на локальном участке достигает 5,6 %, однако оно обусловлено спецификой теста, и для уменьшения отклонения необходимо использовать еще более подробную сетку. Приведем результат расчета одного из тестов с аналитическим решением.

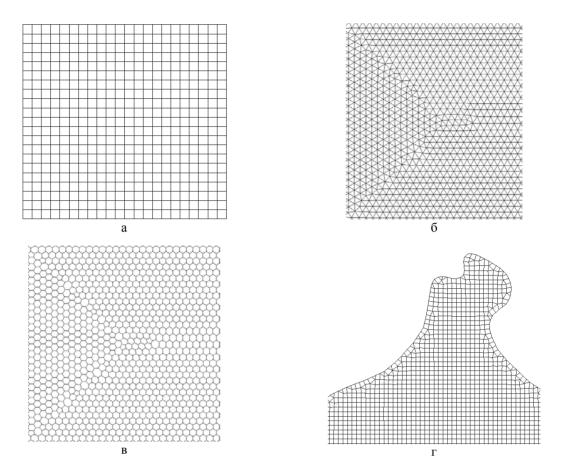


Рис. 1. Виды сеток, используемых в расчетах

Задача 1. Приток жидкости к совершенной скважине в неоднородной пористой среде. Полная постановка задачи приведена в работе [7]. Область в виде квадратного параллелепипеда [x:(0, 200); y(-100, 100); z:(0, 10)] заполнена пористой средой (коэффициент пористости m = 0,3).

$$K(y) = \begin{bmatrix} 5 \cdot I, & y > 0, \\ I, & y < 0. \end{bmatrix}$$

В точке [x = 100, y = 50] расположена вертикальная скважина диаметром 1 м с заданным дебетом  $Q = -1000 \text{ m}^3/\text{сут}$ .

На боковой границе области задано условие для напора

$$H(x,y) = \begin{bmatrix} \frac{10}{\pi} \left( ln \left( (x-100)^2 + (y-50)^2 \right) + \frac{2}{3} ln \left( (x-100)^2 + (y+50)^2 \right) \right), & y > 0, \\ \frac{50}{3\pi} ln \left( (x-100)^2 + (y-50)^2 \right), & y \le 0. \end{cases}$$
 (5)

На кровле и подошве задано условие  $\frac{\partial H}{\partial n} = 0$ . Рассчитывается стресс-период — 1 сутки.

Формула аналитического решения во всей области совпадает с формулой (5).

Задача описывается уравнением

$$\operatorname{div}(K\operatorname{grad} H) = Q\delta(x-100)\delta(y-50).$$

Для решения задачи использовалась неструктурированная треугольная сетка. Средний размер ребра плановой сетки 1,5 м. Количество ячеек в расчете примерно 71 000.

На рис. 2 (см. также цв. вкл.) показано численное решение (в виде поля напоров) с наложенным на него аналитическим решением (черные линии) на момент времени t=1 сутки. Фиолетовыми линиями показаны изолинии численного решения (напор 47,5 м, 42,5 м, 37,5 м).

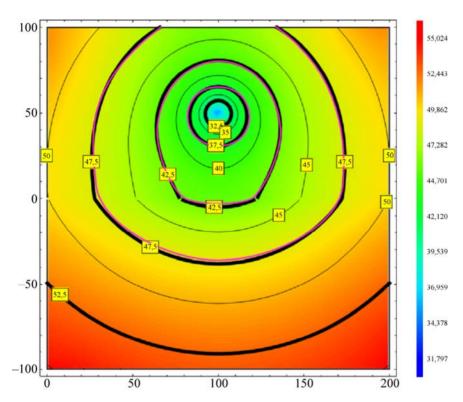


Рис. 2. Поле напора на момент времени t = 1 сутки

Сравнение результатов численного и аналитического решений показывает хорошее согласие. Относительное отклонение в тесте составляет 3 %.

В расчетах тестов, не имеющих аналитического решения, сравнение результатов производилось с решениями, полученными по стандартным программным комплексам [1-3]. Приведем результаты расчетов некоторых тестов, не имеющих аналитического решения.

Задача 2. Тепловая конвекция с изменением плотности в фильтрационном потоке (задача Элдера). Постановка задачи приведена в [2]. Схематично постановка задачи показана на рис. 3. Прямоугольная область размером  $600 \times 150$  м, ограниченная жесткими стенками, заполнена пористой средой (коэффициент пористости m = 0,1). Верхняя граница области поддерживается холодной (T = 0), а посередине нижней границы (150 < x < 450) задана температура T = 100. В нижних углах области задан постоянный напор H = 0. Учитывается сила тяжести. Со временем развивается неоднородное течение среды.

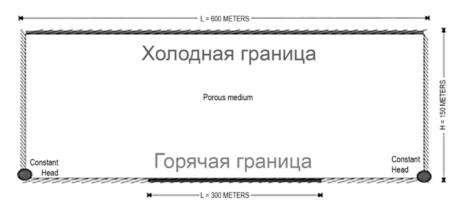


Рис. 3. Постановка задачи Элдера

Для решения задачи использовалась регулярная четырехугольная сетка. Средний размер ребра плановой сетки 5 м. Количество ячеек в расчете 3 600.

На рис. 4 приведены изолинии температуры на время t = 20 лет, полученные по комплексу НИМФА, и решения, полученного по SEAWAT 2000 V\_4. Из рисунка видно качественное согласие результатов.

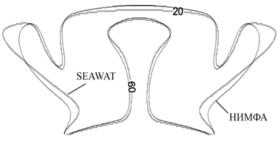


Рис. 4. Изолинии температуры на t = 20 лет

Различия в значениях изолиний могут быть обусловлены иным выбором расчетного шага или схемой расчета одного счетного шага (например, итерированием плотности).

Задача 3. Перенос нейтрального трассера на модели территории промышленной площадки Госкорпорации «Росатом». Геомиграционная модель территории промышленной площадки объекта Госкорпорации «Росатом» была разработана специалистами ФГБУ «Гид-

роспецгеология» с помощью PMWIN-8 (и комплекса MT3DMS в его составе), а затем воспроизведена с использованием средств ПК НИМФА. Количество слоев геомиграционной задачи 23. Слои получены дроблением слоев исходной геологической модели. Модельное время в расчете — примерно 60 тыс. суток (составлялся прогноз на 165 лет). Проводилось моделирование распространения нейтрального трассера от источников загрязнения.

Верификация проводилась путем сопоставления результатов решения геомиграционной задачи, полученных ранее ФГБУ «Гидроспецгеология» с использованием ПК МТ3DMS, и результатов, полученных с помощью ПК НИМФА. На рис. 5 (см. также цв. вкл.) показано сопоставление ореолов нейтрального трассера в первом модельном слое.

На рис. 6 приведено сопоставление массы нейтрального трассера по модельным слоям, рассчитанное в ПК MT3DMS и ПК НИМФА.

Из рис. 5, 6 видно качественное и количественное согласие результатов. Относительное отклонение результатов ПК MT3DMS и ПК НИМ $\Phi$ A в водоносных пластах не превышает 1,5 %, а в слабопроницаемых – не более 9 % (в отдельных ячейках).

Расчет геомиграционной модели также проводился в параллельном режиме. Как было сказано выше, модельное время составляло 60 тыс. суток. Расчет в последовательном режиме по ПК MT3DMS занял примерно 11 ч. Использование параллельного режима вычислений (240 вычислительных ядер) позволило провести расчет по ПК НИМФА за 5 минут.

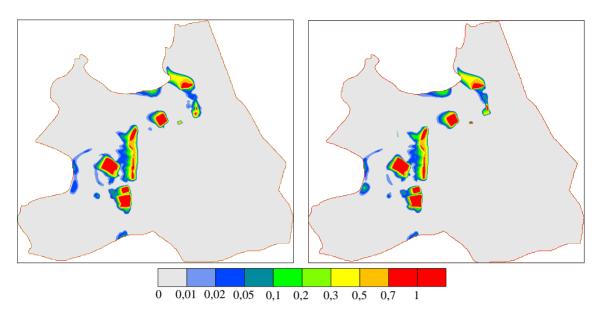


Рис. 5. Сопоставление ореолов нейтрального трассера, рассчитанных с использованием ПК MT3DMS (слева) ПК НИМФА (справа) в 1-м модельном слое

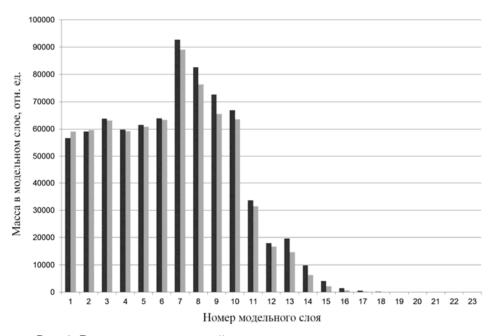


Рис. 6. Сопоставление массы нейтрального трассера по модельным слоям, рассчитанное по ПК MT3DMS ( $\blacksquare$ ) и ПК НИМФА ( $\blacksquare$ )

Задача о переносе нейтрального трассера и двух радионуклидов на территории бывшего Кирово-Чепецкого химического комбината. Расчет данной задачи был выполнен по заказу ГК «Росатом» в сотрудничестве с ФГБУ «Гидроспецгеология». Средствами ПК НИМФА созданы геофильтрационная и геомиграционная модели территории комбината. Созданная модель содержала 2,9 млн ячеек, прогноз проводился на 44 года. По результатам расчетов этих моделей получено хорошее качественное и количественное согласие распределения концентраций с пакетом MODFLOW. Относительная погрешность составляет менее 1,5 %. Относительно времени расчета данной задачи по MODFLOW (7 ч) ускорение вычислений по комплексу НИМФА (600 процессоров, время счета 3,5 мин) составило более 110 раз.

## Заключение

Разработан комплекс программ НИМФА, предназначенный для численного моделирования нестационарных трехмерных неизотермических геофильтрационных и геомиграционных задач фильтрации. В комплексе реализована методика решения нелинейной однофазной фильтрации жидкости и тепломассопереноса в пористых средах. Разработана матрица верификации. На тестах с аналитическим решением показано, что погрешность результатов не превышает 5,6 %. На тестах, не имеющих аналитического решения, показано качественное и количественное согласие со стандартными мировыми программными комплексами.

Отличительной особенностью комплекса НИМФА является использование суперкомпьютерных технологий, позволяющих проводить расчеты литологически сложных моделей в параллельном режиме на современных вычислительных системах. Это сокращает сроки проведения расчетов на порядки и повышает точность результатов за счет использования более подробной сеточной дискретизации рассчитываемых моделей.

# Список литературы

- 1. Сайт программного продукта MODFLOW-USG [Электронный ресурс]. http://www.swstechnology.com/blog/modflow-usg-unstructured-grids-a-game-changer-for-groundwater-modeling.
- 2. Dausman A. M., Langevin C. D., Thorne D. T., Jr., Sukop M. C. Scientific application of SEAWAT to select variable-density and viscosity problems. Investigations Report 2009–5028, U. S. Department of the Interior U. S. Geological Survey.
- 3. Официальный сайт компании Lawrence Berkeley National Lab. Earth Sciences Division [Электронный ресурс]. http://esd.lbl.gov/research/projects/tough/software.
- 4. Бутнев О. И., Горев И. В., Колесников С. С. и др. Полностью неявная схема решения задач трехфазной фильтрации на неструктурированных сетках в пакете программ НИМ $\Phi$ A // Вестник кибернетики. 2015. № 3(19). С. 53–69.
- 5. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бартенев Ю. Г. и др. Параллельные решатели СЛАУ в пакетах программ РФЯЦ-ВНИИЭФ // Вестник ПНИПУ. Аэрокосмическая техника. 2016. Вып. 47. С. 73–92.
- 6. Сидоров М. Л., Пронин В. А. Неструктурированная призматическая дискретизация сложных геологических структур в параллельном режиме // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2015. Вып. 1. С. 47–55.
  - 7. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. М.: Наука, 1977.

# NIMFA Software Complex for Solving Problems of Nonlinear Single-Phase Fluid Flows and Heat-and-Mass Transport in Porous Media

R. M. Shagaliev, O. I. Butnev, M. L. Glinskii, A. A. Kuvaev, A. N. Bakhaev, I. V. Gorev, M. V. Zhuravleva, S. S. Kolesnikov, E. N. Lysova, P. A. Mashenkin, V. A. Pronin, M. E. Semenov, M. L. Sidorov

The paper describes NIMFA software complex and techniques used to solve the single-phase fluid flow and heat-and-mass transport problems in porous media. The principal equations of the simulated processes and grids in use are presented. The qualitative and quantitative agreement between the results obtained for the problems having exact solutions and those solved using other program complexes is demonstrated (5 figures, 2 tables, 7 references).

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 44 55

# Пакет программ ЛОГОС. Модуль решения динамических задач прочности

Д. Ю. Дьянов, В. Ф. Спиридонов,

К. В. Циберев, Е. И. Наумова,

В. В. Борляев, С. В. Стародубов,

Е. В. Шувалова, М. В. Медведкина,

Е. О. Артемова, А. А. Челаков,

А. В. Казанцев, А. А. Рябов,

В. И. Романов, С. С. Куканов

Рассматривается конечно-элементный модуль, реализованный в пакете программ ЛОГОС для решения динамических задач прочности. Дается краткое описание методов и алгоритмов, входящих в состав модуля. В качестве иллюстраций применения разработанного модуля динамической прочности представлены результаты расчетов ряда практических задач.

# Введение

В настоящее время разрабатывается отечественный многофункциональный пакет программ инженерного анализа ЛОГОС [1–3] для решения связанных и сопряженных задач тепломассопереноса и прочности на многопроцессорных вычислительных системах. Одним из основных компонентов пакета программ ЛОГОС является модуль решения динамических задач прочности, построенный на основе пакета программ ЛЭГАК-ДК [4–6]. Данный модуль ориентирован на моделирование быстропротекающих процессов деформирования и разрушения конструкций с учетом различных нелинейностей. Примером задач, решаемых с использованием модуля динамической прочности, может служить моделирование крэш-тестов, пробития различных преград, взрывных воздействий на различные конструкции и т. д. Большинство динамических задач прочности характеризуются долгим временем счета и требуют больших вычислительных ресурсов. Поэтому основным принципом, который лежит в основе разработки модуля для их решения, является высокая эффективность алгоритмов при выполнении на многопроцессорных вычислительных системах.

В работе приводится описание конечно-элементного модуля, реализованного в пакете программ ЛОГОС для расчета задач динамической прочности конструкций. Для демонстрации применимости и эффективности реализованных алгоритмов представлены результаты численного моделирования ряда сложных инженерных задач.

# Описание модуля динамической прочности

# Формулировка основных дифференциальных уравнений

Рассмотрим деформацию во времени произвольного фиксированного объема  $b_0$ , ограниченного поверхностью  $\partial b = \partial b_1 \cup \partial b_2 \cup \partial b_3$ . Будем рассматривать движение тела в лагранжевой форме с массовыми координатами  $X_j$ :

$$x_i = x_i(X_j, t),$$
  
$$x_i(X_j, 0) = X_j.$$

Уравнение сохранения количества движения можно записать в виде

$$\rho \ddot{x}_i = \sigma_{ii,j} + \rho f_i. \tag{1}$$

Граничные условия по напряжениям на границе (условие Неймана):

$$\sigma_{ij}n_j\Big|_{\partial b_1}=\tau_i(t).$$

Граничные условия по смещениям на границе (условие Дирихле):

$$x_i(\mathbf{X},t)\big|_{\partial b_2} = D_i(t).$$

На поверхности разрыва  $\partial b_3$  выполнено условие непрерывности нормальной составляющей тензора напряжений:

$$(\sigma_{ij}^+ - \sigma_{ij}^-)n_j = 0.$$

Начальные условия можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} &\sigma_{ij}\Big|_{t=0} = \sigma^0_{ij}, \\ &e\Big|_{t=0} = e^0, \\ &\rho\Big|_{t=0} = \rho^0, \\ &\dot{x}_i\Big|_{t=0} = v^0. \end{aligned}$$

Здесь и выше использованы следующие обозначения:  $\sigma_{ij}$  — тензор напряжений;  $\sigma_{ij,j}$  — его производная по j-й компоненте; e — внутренняя энергия единицы объема;  $\rho$  — плотность;  $f_i$  — объемная сила; v — скорость;  $\ddot{x_i}$  — ускорение;  $n_j$  — внешняя нормаль к границе.

Закон сохранения массы для лагранжевого подхода записывается в следующем виде:

$$\rho \frac{\partial x_i}{\partial X_j} = \rho_0.$$

Уравнение энергии:

$$\dot{e} = \eta s_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} - p \dot{\eta},$$

где  $s_{ij}$ ,  $\dot{\epsilon}_{ij}$ , p и  $\eta$  – соответственно компоненты девиаторов тензоров напряжений и скоростей деформации, давление и удельный объем.

Уравнение состояния и соотношение для определения компонент девиатора тензора напряжений, соответствующие используемому материалу, служат для замыкания приведенных уравнений.

Построение конечно-элементной аппроксимации по пространству для уравнения импульса. Введем обозначение  $x_{\alpha i}$  – координата узла с номером  $\alpha$  в i-м направлении. Предположим, что значения перемещения, скорости и ускорения могут быть интерполированы узловыми значениями в любой точке среды. Для интерполяции будем использовать базисные функции  $N_{\alpha}(\mathbf{x})$  (здесь индекс  $\alpha$  означает привязку данной функции к узлу  $\alpha$ ), которые называются  $\phi$  ункциями  $\phi$  ормы. Перемещения, скорости и ускорения теперь можно записать в следующем виде:

$$\begin{split} &x_i(\mathbf{X},t) = N_{\alpha}(\mathbf{X})x_{\alpha i},\\ &\dot{x}_i(\mathbf{X},t) = N_{\alpha}(\mathbf{X})\dot{x}_{\alpha i},\\ &\ddot{x}_i(\mathbf{X},t) = N_{\alpha}(\mathbf{X})\ddot{x}_{\alpha i}. \end{split}$$

Конечно-элементная формулировка уравнения (1) может быть получена различными способами: методом взвешенных невязок [7], с использованием вариационных принципов [8] или методом перемещения [9]. Применяя любой из указанных подходов, получаем

$$\left(\int_{b} \rho N_{\beta} N_{\alpha} d\Omega\right) \ddot{x}_{\beta i} = -\int_{b} \sigma_{ij} \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial x_{j}} d\Omega + \int_{b} \rho f_{i} N_{\alpha} d\Omega + \int_{\partial b_{1}} \tau_{i} N_{\alpha} ds, \quad i = 1, ..., 3, \quad \alpha = 1, ..., N_{y_{3\Pi}}, \quad \beta = 1, ..., N_{y_{3\Pi}}. \quad (2)$$

Рассмотрим подробнее полученную систему уравнений (2). Слева в квадратных скобках – матрица, которую называют *согласованной матрицей масс*:

$$M'_{\alpha\beta} = \int_{b} \rho N_{\beta} N_{\alpha} d\Omega.$$

Уравнения системы (2) согласованы благодаря тому, что матрица масс не является диагональной. Однако для упрощения решения системы вместо согласованной матрицы используют диагональную матрицу масс:

$$M'_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \int_{b} \rho N_{\alpha} d\Omega = \begin{cases} \int \rho N_{\alpha} d\Omega, & \alpha = \beta, \\ b \\ 0, & \alpha \neq \beta. \end{cases}$$

Соответственно (2) с применением диагональной матрицы масс запишется в виде

$$\left(\int_{b} \rho N_{\alpha} d\Omega\right) \ddot{x}_{\alpha i} = -\int_{b} \sigma_{ij} \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial x_{j}} d\Omega + \int_{b} \rho f_{i} N_{\alpha} d\Omega + \int_{\partial b_{1}} \tau_{i} N_{\alpha} ds, \quad i = 1, \dots, 3, \quad \alpha = 1, \dots, N_{y_{3,II}}.$$
(3)

Как указано в [10], диагонализация матрицы масс дает не только простое вычислительное упрощение, но и позволяет получить наилучший результат для импульсных нагрузок.

При интегрировании соотношений (3) в пакете программ ЛОГОС может использоваться как одноточечное, так и многоточечное интегрирование.

В вышеприведенных выражениях функции формы определены в глобальной системе координат. Данный подход не очень удобен при программной реализации, так как сильно затрудняет

разработку универсального конечно-элементного кода. Поэтому используются локальные координаты, «привязанные» к текущему элементу, например барицентрические координаты для треугольника, изопараметрические координаты и т. д.

В настоящее время в модуле решения динамических задач прочности пакета программ ЛОГОС реализована достаточно обширная библиотека конечных элементов, включающая в себя элементы сплошной среды (шестигранный элемент с одноточечным интегрированием, шестигранные элементы с многоточечным интегрированием (несколько модификаций), четырехузловой и десятиузловой тетраэдральные элементы), оболочечные элементы Белычко – Лин – Цая [11] (четырехузловой и трехузловой), оболочечные элементы Хьюса – Лю [12, 13] (четырехузловой и трехузловой), балочные элементы Белычко – Лин – Цая и Хьюса – Лю, стержневой элемент, дискретные элементы (пружина, точечная масса).

**Интегрирование уравнения импульса по времени.** Для решения уравнения (1) по времени в пакете программ ЛОГОС используется следующие явные конечно-разностные схемы интегрирования:

- центрально-временная конечно-разностная схема типа *крест* [14]: имеет второй порядок точности по времени и условно устойчива при выполнении условия Куранта;
- схема методики ЛЭГАК [15, 16]: обладает первым порядком аппроксимации по времени и условно устойчива при выполнении условия Куранта.

**Алгоритмы сглаживания.** При решении задач с использованием элементов с одноточечным интегрированием могут возникать искажения счетной сетки (рис. 1), приводящие к снижению качества и точности расчета. Данные искажения могут быть вызваны свойствами схем интегрирования, погрешностью аппроксимации схемы, ошибками округления и т. п. Следуя зарубежной литературе [17–19], для обозначения данного вида деформаций будем использовать термин режим песочных часов, поскольку вид ячеек сетки при данных искажениях часто напоминает песочные часы.

В модуле решения динамических задач прочности пакета программ ЛОГОС реализованы следующие алгоритмы сглаживания возмущений, приводящих к режиму песочных часов: вязкостное сглаживание [17], вязкостное сглаживание Флагмана – Белычко, жесткостное сглаживание Флагмана – Белычко [18], жесткостное сглаживание для материалов, близких к несжимаемым [19].

Тип сглаживания стоит выбирать с учетом характера происходящих процессов. Для высоких скоростей нагружения и при больших деформациях рекомендуется использовать вязкостные типы сглаживания, а для низких скоростей или при малых деформациях системы – жесткостные [18].

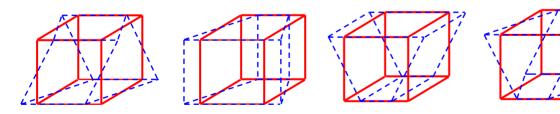


Рис. 1. Нефизические типы деформации ячейки сетки

**Контактное взаимодействие.** В настоящий момент в модуле динамической прочности пакета программ ЛОГОС выполнена программная реализация алгоритмов контактного взаимодействия элементов конструкции, представленных оболочечными элементами или элементами сплошной среды, с возможностью учета эффектов отскока, скольжения, разрушения и трения. Основной идеей всех реализованных алгоритмов является отслеживание проникания одного тела в другое и выработка контактных сил, препятствующих данному прониканию. При этом расчет контактного взаимодействия разделяется на два основных этапа: определение зоны контакта и вычисление контактных сил. Определение зоны контакта реализовано на основе алгоритма глобального поиска LPOCA (Linear POsition Code Algorithm) и алгоритмов локального поиска методом узел – грань [20] или грань – грань [21]. Вычисление контактных сил проводится на основе метода штрафа [20] или метода множителей Лагранжа [22].

**Модели упругопластического деформирования и разрушения. В** модуле решения динамических задач прочности пакета программ ЛОГОС реализован ряд уравнений состояния, моделей упругопластического деформирования и разрушения, среди которых имеется набор широко известных, используемых в большинстве коммерческих пакетов программ, а также набор моделей материалов общего фонда [23].

Реализованы следующие уравнение состояния и модели упругопластического деформирования: уравнение состояния идеального газа; полиноминальное уравнение состояния; уравнение состояния Ми – Грюнайзена; модели упругого изотропного материала, упругопластического материала с изотропным и кинематическим упрочнением, упругого ортотропного материала, упругопластического материала с температурной зависимостью, анизотропного материала, упругого материала с учетом эффектов ползучести, упругопластического материала с разными пределами текучести на сжатие и растяжение, вязкоупругого материала, пористого материала с анизотропными свойствами, материала с кусочно-линейной диаграммой деформирования, недеформируемого материала, упругого композитного материала, грунтов и пеноматериалов; модель резины Блатц – Ко; модель Джонсона – Кука; модель керамики, стекла и других хрупких материалов.

Для моделирования разрушения в модуле динамической прочности пакета программ ЛОГОС доступны следующие критерии разрушения: по максимальному давлению; по минимальному давлению; по эквивалентному напряжению; по минимальной главной деформации; по максимальной главной деформации; по сдвиговой деформации; по главному напряжению; по выбранному шагу; критерии Тулера – Бутчера, Галилея – Лейбница, Кулона – Мора, Писаренко – Лебедева, Цая – Ву, Хоффмана, Мизеса – Хилла.

**Принципы распараллеливания. В** модуле динамической прочности пакета программ ЛОГОС реализовано гибридное MPI/OpenMP-распараллеливание. Взаимодействие распределенных вычислительных узлов осуществляется при помощи MPI, на каждом узле реализовано распараллеливание на модели общей памяти с помощью OpenMP.

В основу распараллеливания модуля динамической прочности пакета программ ЛОГОС положены следующие принципы:

- 1) возможность выполнения пространственной декомпозиции как с использованием открытого кода ParMETIS [24], так и с применением методов геометрической декомпозиции (например, алгоритмы рекурсивной координатной бисекции);
- 2) использование механизма перекрытия по данным на межпроцессорных границах с реализацией системы межпроцессорных обменов по стандарту MPI;
- 3) отсутствие программных ограничений на количество используемых процессоров (такое ограничение может быть обусловлено только размерами конкретной рассчитываемой задачи);
- 4) переносимость комплекса программ на другие вычислительные системы с распределенной памятью, поддерживающие стандарт передачи сообщений MPI.

Для ОрепМР-распараллеливания предусмотрена дополнительная фрагментация счетной области внутри МРІ-процесса. Это позволяет распараллелить некоторые вычислительные блоки простым распределением фрагментов по нитям.

# Результаты расчетов

В качестве иллюстраций применения пакета программ ЛОГОС для численного решения задач динамической прочности в данном разделе представлены результаты расчетов практических залач.

Расчетные исследования жесткой посадки самолета с убранными шасси. Все разрабатываемые пассажирские самолеты должны удовлетворять современным правилам, включая требования безопасности и надежности конструкции в возможных аварийных ситуациях. В соответствии с международными и национальными правилами в числе возможных аварий необходимо рассмотреть различные варианты жесткой посадки самолета и оценить напряженно-деформированное состояние элементов конструкции планера, узлов подвески шасси и двигателя для анализа возможности разрушения элементов их крепления и нарушения герметичности топливных баков.

В задаче демонстрируется возможность применения пакета программ ЛОГОС для моделирования динамической реакции самолета при жесткой посадке [25–28]. Начальные и граничные условия задачи представлены на рис. 2.

Для расчетов приняты следующие кинематические начальные условия: продольная скорость 68,6 м/с, вертикальная скорость 5 м/с. Для моделирования взлетно-посадочной полосы используется граничное условие типа жесткая стенка.

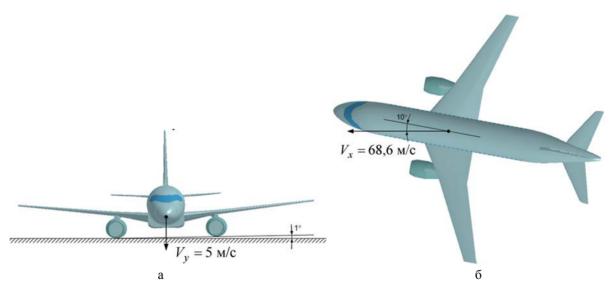


Рис. 2. Начальные и граничные условия для моделирования динамической реакции самолета при аварийной посадке: а – вид спереди; б – вид сверху

Пространственная дискретизация самолета выполнена с использованием различных типов конечных элементов: объемных, оболочечных, балочных и дискретных. Построенная детализированная конечно-элементная модель включает в себя 2050 подобластей, содержит 188416 узлов и 207354 элементов. Для демонстрации сложности модели на рис. 3 приведен балочный каркас самолета.

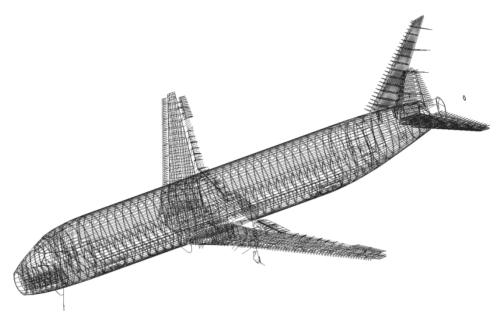


Рис. 3. Балочный каркас самолета

Расчет проводился в параллельном режиме (MPI) на 16 процессорах. Задача считалась приблизительно 3 часа. Эффективность распараллеливания ~75 %.

На рис. 4 (см. также цв. вкл.) представлено поле интенсивности напряжений в корпусе самолета на момент времени  $t=377\,$  мс. На рис. 5 приведены временные зависимости перемещений и скоростей центра масс самолета.

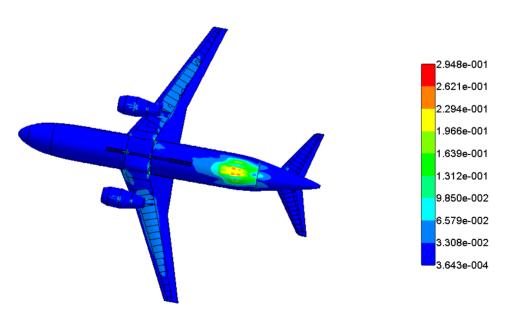


Рис. 4. Интенсивность напряжений в корпусе самолета на момент времени 377 мс

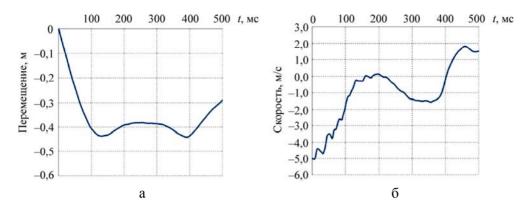


Рис. 5. Временные зависимости для центра масс самолета: а – вертикальное перемещение; б – вертикальная скорость

**Численное моделирование динамического деформирования активной зоны реакторной установки при разрыве технологического канала.** В задаче демонстрируется возможность моделирования в пакете программ ЛОГОС напряженно-деформированного состояния элементов конструкции активной зоны реакторной установки под давлением пароводяной смеси при разрыве одного из технологических каналов (ТК) [29, 30].

Начальная геометрия задачи приведена на рис. 6, 7.

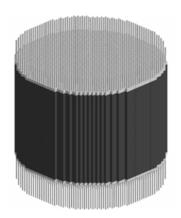


Рис. 6. Активная зона реакторной установки. Общий вид

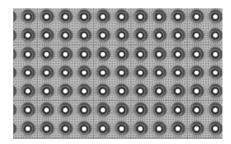


Рис. 7. Фрагмент конечно-элементной сетки. Вид сверху

В модели учитывается 1914 графитовых колонн. Конечно-элементная сетка состоит из объемных восьмиузловых элементов и оболочных четырех узловых элементов. Число конечных элементов сетки, покрывающей расчетную область, равно 160757760.

В расчетах учитывается напряженно-деформированное состояние конструкции от действия силы тяжести и внутреннего стационарного давления в ТК. Жидкость в трубах ТК учитывается в виде присоединенной массы. Для моделирования ТК использовалась упругопластическая модель, а для моделирования графитовых блоков – модель упругого материала.

Для расчета взаимодействия друг с другом различных элементов конструкции в процессе деформирования используются алгоритмы контактного взаимодействия с автоматическим определением зон контакта.

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Расчет проводился в параллельном режиме (MPI) на 1250 вычислительных ядрах. Задача считалась около 20 дней. Эффективность распараллеливания составила ~70 %.

На рис. 8 (см. также цв. вкл.) показано деформирование графитовой кладки в центральном поперечном сечении на момент времени t = 1,6 с.

На рис. 9 представлен график максимального прогиба ТК. Анализ полученных результатов показывает, что при разрыве одного ТК в четырех колоннах нижней границы реакторной установки максимальный прогиб можно оценить значением ~350 мм.

На рис. 10 (см. также цв. вкл.) представлен общий вид ТК при t = 1,6 с. Видно, что ближние колонны от разбухания кладки и разрыва канала деформировались достаточно сильно.

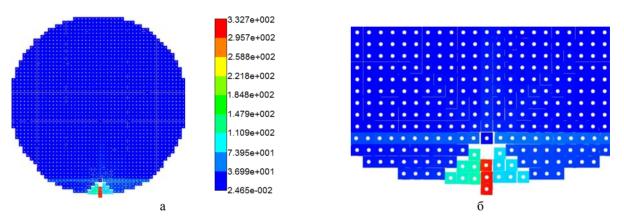
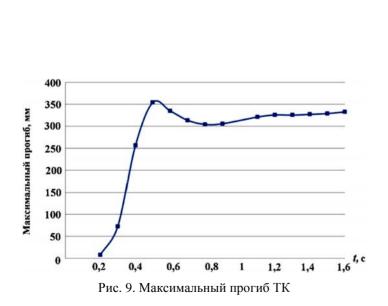


Рис. 8. Поле полных смещений графитовой кладки в центральном поперечном сечении, t = 1,6 с: a -общий вид, 6 -приближенный вид места разрыва



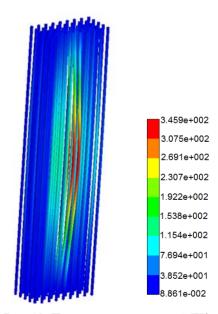


Рис. 10. Поле полных смещений ТК. Общий вид при t = 1,6 с

### Заключение

В работе представлены основные методы и алгоритмы, используемые в модуле решения динамических задач прочности пакета программ ЛОГОС. Кратко описаны реализованные типы элементов, алгоритмы контактного взаимодействия, типы сглаживания, принципы распараллеливания и реализованные на текущий момент модели упругопластического деформирования и разрушения. Применимость приведенных подходов показана на примере численного решения двух инженерных задач.

# Список литературы

- 1. Дерюгин Ю. Н., Козелков А. С., Спиридонов В. Ф. и др. Многофункциональный высокопараллельный пакет программ ЛОГОС для решения задач тепломассопереноса и прочности // Сб. тез. докл. С.-Петербургского науч. форума «Наука и общество». С.-Пб.: Изд-во Политех. ун-та, 2012.
- 2. Александрова О. Л., Барабанов Р. А., Дьянов Д. Ю. и др. Пакет программ ЛОГОС. Конечноэлементная методика расчета задач статической прочности конструкций с учетом эффектов физической и геометрической нелинейности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2014. Т. 3. С. 3–17.
- 3. Казанцев А. В., Дьянов Д. Ю., Циберев К. В. и др. Комплекс программ ЛОГОС. Реализация алгоритмов моделирования прочности конструкций методом конечных элементов и методом сглаженных частиц // Теоретические основы конструирования численных алгоритмов и решение задач математической физики: тез. докл. XXI Всерос. конф. и Молодежной школы-конф., посвященной памяти К. И. Бабенко. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2016. С. 86–87.
- 4. Циберев К.В, Артамонов М. М., Авдеев П. А. и др. Основные принципы реализации пакета программ ЛЭГАК-ДК для расчета задач прочности и газодинамики на неструктурированных сетках // Сб. докл. 8-й науч.-техн. конф. «Молодежь в науке». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. С. 153—160.
- 5. Корсакова Е. И., Дьянов Д. Ю., Симонов Г. П. и др. Результаты верификации моделей упругопластического деформирования и разрушения, реализованных в пакете программ ЛЭГАК-ДК // Тр. XII Межд. семинара «Супервычисления и математическое моделирование». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2010. С. 163–173.
- 6. Дьянов Д. Ю., Борляев В. В., Корсакова Е. И. и др. Методы расчета газодинамических и упругопластических течений в лагранжевых переменных на неструктурированной сетке // Тез. докл. Х Междунар. конф. «Забабахинские науч. чтения». Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2010. С. 260.
- 7. Benson D. J. Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes // Com. Meth. App. Mech. and Eng. 1992. Vol. 99. P. 235–394.
- 8. Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. М.: Мир, 1986.
- 9. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979.
- 10. Rank E., Katz C., Werner H. On the importance of the discrete maximum principle in transient analysis using finite element methods // Int. J. Num. Meth. Eng. 1983. Vol. 19. P. 1771–1782.

- 11. Belytschko T., Liu W. K., Moran B. Nonlinear finite elements for continua and structures. John Wiley & Sons, LTD, 2000.
- 12. Belytschko T., Tsay C. S., Liu W. K. Explicit algorithms for the nonlinear dynamics of shell // Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 1981. Vol. 29, N 3. P. 313–327.
- 13. Hughes T. J. R., Liu W. K. Nonlinear finite element analysis of shells. Part I: Three-dimension shells / Ibid. 1981. Vol. 26. P. 331–362.
- 14. Hughes T. J. R., Liu W. K. Nonlinear finite element analysis of shells. Part II: Two-dimension shells // Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 1981. Vol. 27. P. 167–182.
- 15. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. и др. 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. Матем. моделирование физ. процессов. 2004. Вып. 4. С. 41–50.
- 16. Бахрах С. М., Величко С. В., Косарим С. С. и др. Явно-неявный алгоритм расчета газодинамических течений в методике ЛЭГАК-3D // Там же. 2006. Вып. 1. С. 14-22.
- 17. Hallquist J. O. LS-DYNA Theoretical manual. Livermore Software Technology Corporation, 2006.
- 18. Flanagan D. P., Belytschko T. A uniform strain hexahedron and quadrilateral and orthogonal hourglass control // Int. J. Numer. Meths. Eng. 1981. Vol. 17. P. 679–706.
- 19. Belytschko T., Bindeman L. Assumed strain stabilization of the 4-node quadrilateral with 1-point quadrature for nonlinear problems // Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 1991. Vol. 88. P. 311–340.
- 20. Oldenburg M., Nilsson L. The position code algorithm for contact searching // Int. J. Num. Meth. Eng. 1994. Vol. 37. P. 359-386.
- 21. Borrvall T. Mortar contact algorithm for implicit stamping analyses in LS-DYNA // LS-DYNA forum. DYNAmore, Ulm, Germany, 2004. P. 7.19–7.28.
- 22. Zong Zhi-Hua. Finite element procedures for contact-impact problems // Explicit solution procedures with the Lagrange multiplier method. 1993. Vol. 28. P. 233–261
- 23. Гордеев Д. Г., Голубкова Е. Ф., Гударенко Л. Ф. и др. Современное состояние пакета программ УРС-ОФ для расчета термодинамических и механических свойств веществ // Тр. XII Международ. семинара «Супервычисления и математическое моделирование». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2010. С. 115—118.
- 24. Karypis G., Schloegel K., Kumar V. ParMeTiS Parralel Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering Library Version 3.1. University of Minnesota, Department of Computer Science and Engineering, 2003.
- 25. Рябов А. А., Литвинов М. С., Попов В. П. Суперкомпьютер для «Суперджета» // Суперкомпьютеры. 2011. Вып. 2. С. 28-30.
- 26. Рябов А. А., Литвинов М. С., Попов В. П. Проблемы безопасности Superjet-100 // Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности. М.: МГУ, 2012. С. 15–21.
- 27. Погосян М. А., Савельевских Е. П., Шагалиев Р. М. и др. Применение отечественных суперком-пьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной техники // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2013. Вып. 2. С. 3–18.

- 28. Погосян М. А., Рябов А. А., Романов В. И. и др. Компьютерный анализ безопасности пассажирского самолета Superjet-100 при аварийной посадке // Авиационная промышленность. 2017. Вып. 2. C.4-10.
- 29. Рябов А. А., Романов В. И., Куканов С. С. и др. Численное исследование динамической прочности кладки РУ РБМК-1000 при разрыве технологического канала // Атомная энергия. 2017. Т. 123. Вып. 5. С. 288–293.
- 30. Рябов А. А., Романов В. И., Куканов С. С. и др. Компьютерный анализ динамической прочности исходной и восстановленной кладки РУ РБМК-1000 при сейсмических воздействиях // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2017. Вып. 22, ч. 1. С. 160–168.

# Logos Program Package. A Module for Soving the Dynamic Strength Problems

D. Yu. D'yanov, V. F. Spiridonov, K. V. Tsiberev, E. I. Naumova, V. V.Borlyaev, S. V. Starodubov, E. V. Shuvalova, M. V. Medvedkina, E. O. Artemova, A. A. Chelakov, A. V. Kazantsev, A. A. Ryabov, V. I. Romanov, S. S. Kukanov

The paper describes a finite-element module implemented in the LOGOS program package for solving the dynamic strength problems. The methods and algorithms implemented in the module are briefly described. The application of the dynamic strength module is illustrated by the example of simulation results for a number of real-world problems.

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 56 67

# Метод расчета движения абсолютно твердого тела в упругопластической среде на неподвижной счетной сетке

Краюхин А. А., Янилкин Ю. В., Стадник А. Л., Егужова М. Ю. Предложен метод BODY-3D расчета движения абсолютно твердого тела в упругопластической среде с учетом силы трения на неподвижной эйлеровой счетной сетке, описана его реализация в методике ЭГАК, приведены результаты тестовых расчетов. Для тестирования использовались две задачи. Для первой задачи — о свободном падении вращающегося твердого тела на преграду — получено аналитическое решение. В качестве второй тестовой задачи рассматривалась задача о движении малодеформируемого ударника в мягком грунте при наклонном внедрении.

# Введение

Вопросам, связанным с изучением особенностей движения малодеформируемых тел в упругопластических средах, посвящено значительное количество работ (их обзор сделан в [1]). В настоящее время активно ведутся экспериментальные и теоретические исследования, а также применяются методы численного моделирования. При численном моделировании в эйлеровых переменных движения малодеформируемых тел (ударников) в упругопластических средах (преградах) возникает ряд проблем, связанных с точностью описания контактных границ между различными веществами [2, 3]. Одним из способов их решения является использование приближения абсолютно твердого (недеформируемого) тела для описания ударника. В настоящей работе предлагается метод ВОДУ-3D расчета на неподвижной счетной сетке совместного поступательного и вращательного движения твердого тела при обтекании упругопластической средой с учетом силы трения. Описана его реализация в методике ЭГАК [4], а также приведены результаты тестовых расчетов.

# 1. Общие положения и численная реализация метода ВОДУ-3Д

Рассмотрим твердое тело (ударник), которое характеризуется массой m, радиусом-вектором центра масс  $\vec{r}_C$  и тензором инерции в главных осях относительно центра масс J. В момент времени t=0 твердое тело ударяется со скоростью  $\vec{V}_0$  о преграду из упругопластического материала.

Требуется рассчитать движение твердого тела в преграде. Уравнения движения твердого тела записываются в виде [5]

$$m\vec{a} = \vec{F}; \ J\frac{d\vec{\omega}}{dt} = \vec{M}.$$

Здесь  $\vec{F}$  и  $\vec{M}$  — сила сопротивления внедрению и момент силы относительно центра масс твердого тела, действующие на твердое тело со стороны преграды;  $\vec{a}$  — ускорение центра масс твердого тела;  $\vec{\omega}$  — вектор угловой скорости вращения твердого тела относительно центра масс. Силу сопротивления внедрению можно найти по формуле [6]

$$\vec{F} = \int_{S} (\sigma_n \vec{n} + \sigma_\tau \vec{\tau}) dS,$$

где  $\sigma_n$  и  $\sigma_{\tau}$  – нормальное и касательное напряжения, действующие на площадке dS поверхности твердого тела;  $\vec{n}$  – единичный вектор нормали к поверхности твердого тела;  $\vec{\tau}$  – единичный вектор тангенциальной компоненты массовой скорости среды на поверхности твердого тела. Последняя из указанных величин равна векторному произведению [6]

$$\vec{\tau} = \vec{m} \times \vec{n}, \quad \vec{m} = \frac{1}{|\vec{V}|} (\vec{n} \times \vec{V}).$$
 (1)

Здесь  $\vec{V}$  — вектор массовой скорости среды относительно неподвижного твредого тела на площадке dS. Касательное напряжение определяется из закона сухого трения Кулона с учетом ограничения прочностными характеристиками вещества преграды:

$$\sigma_{\tau} = \begin{cases} 0, & \sigma_{n} < 0; \\ \min\{\mu\sigma_{n}Y\}, & \sigma_{n} \ge 0, \end{cases}$$

где  $\mu = \text{const} - \text{коэффициент трения}; \ Y - предел текучести вещества окружающей среды. Полагается, что при сжатии среды <math>\sigma_n > 0$ . Момент силы по определению равен

$$\vec{M} = \int_{S} \vec{r} \times (\sigma_n \vec{n} + \sigma_\tau \vec{\tau}) dS, \qquad (2)$$

где  $\vec{r}$  – радиус-вектор элемента поверхности твердого тела dS, на который действует сила  $d\vec{F} = (\sigma_n \vec{n} + \sigma_\tau \vec{\tau}) dS$  относительно центра масс.

На практике часто встречается ситуация, когда требуется рассчитать внедрение ударника в преграду при подходе под углом  $\theta$  к ее поверхности с углом атаки  $\alpha$ . Угол скольжения при этом задается нулевым  $\beta=0$ . Предположим, что твердое тело является телом вращения или по крайней мере имеет плоскость симметрии, перпендикулярную поверхности преграды. Рассмотрим движение такого тела в системе координат (x, y, z), связанной с неподвижной преградой.

Пусть в начальный момент времени вектор скорости  $\vec{V_0}$  лежит в плоскости xOy декартовой системы координат, которая является плоскостью симметрии ударника и преграды. В этом случае сила сопротивлению внедрению имеет вид  $\vec{F} = (F_x, F_y, 0)$ , момент силы  $\vec{M} = (0, 0, M_z)$ , а угловая

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

скорость вращения  $\vec{\omega} = (0,0,\omega)$ . Тогда количество уравнений, описывающих движение твердого тела, сокращается с шести до трех:

$$ma_x = F_x, \quad ma_y = F_y, \quad J_C \frac{d\omega}{dt} = M_z.$$
 (3)

Здесь  $J_C$  — момент инерции твердого тела вокруг оси z относительно центра масс; угловую скорость вращения твердого тела вокруг оси z относительно центра масс  $\omega$  можно рассчитать по формуле

$$\omega = \frac{1}{J_C} \int M_z dt. \tag{4}$$

Рассмотрим движение среды в системе отсчета (x',y',z'), в которой твердое тело покоится. Пусть ее начало координат находится в центре масс твердого тела. Из-за того что твердое тело при проникании может иметь вращательную составляющую движения наряду с поступательной, система отсчета (x',y',z') по отношению к системе отсчета (x,y,z) является неинерциальной. Следуя [5], будем называть движение среды относительно неподвижной инерциальной системы отсчета (x,y,z) абсолютным, движение среды во вращающейся неинерциальной системе отсчета (x',y',z') — относительным, а движение подвижной системы отсчета (x',y',z') относительно неподвижной (x,y,z) — переносным. Пусть система отсчета (x',y',z') вращается с угловой скоростью (x,y,z)0 относительно неподвижной системы отсчета (x,y,z)1. Выражение для связи скоростей в системах отсчета (x,y,z)2 и (x',y',z')3 имеет вид [5]

$$\vec{V}^{\text{afc}} = \vec{V}^{\text{OTH}} + \vec{V}^{\text{nep}}.$$
 (5)

Изменение относительной скорости записывается в виде

$$d\vec{V}^{\text{OTH}} = \left(\vec{a}^{\text{OTH}} + \vec{\omega} \times \vec{V}^{\text{OTH}}\right) dt. \tag{6}$$

Переносная скорость равна

$$\vec{V}^{\text{nep}} = \vec{\omega} \times \vec{r}. \tag{7}$$

Здесь  $\vec{r}$  — радиус-вектор элемента среды относительно начала координат системы отсчета (x', y', z'). Приращение координат элемента среды в системе отсчета (x, y, z) определяется выражением

$$d\vec{r} = \vec{V}^{a\delta c}dt. \tag{8}$$

Методом BODY-3D будем называть способ расчета пространственного движения твердого тела в упругопластической среде на неподвижной счетной сетке, который заключается в численном моделировании течения среды, окружающей твердое тело, в неинерциальной системе отсчета (x', y', z'), связанной с неподвижным твердым телом.

При численной реализации метода BODY-3D в методике ЭГАК использовался следующий подход. Для описания вещества твердого тела вводится специальный компонент (так называемый несжим). Грани ячеек с этим компонентом являются жесткими стенками, на которых равны нулю нормальные компоненты скорости и разрешается свободное тангенциальное скольжение вещества. Этот компонент занимает ячейку полностью. Содержание других компонентов в такой ячейке не допускается, т. е. такая ячейка не может быть смешанной. В процессе счета потоки вещества из такой ячейки или в такую ячейку отсутствуют, и, таким образом, твердое тело неподвижно относительно счетной сетки. В методике ЭГАК счетная сетка, как правило, образована прямыми,

параллельными осям декартовой системы координат. Поскольку вещество *несжим* должно занимать ячейку полностью, его границы проходят по линиям сетки. Точность такого описания реальных границ твердого тела, несовпадающих с линиями счетной сетки, составляет до половины линейного размера ячейки. Это связано с тем, что после расчета начальных данных смешанные ячейки, содержащие вещество *несжим*, или освобождаются от него, или, наоборот, заполняются им полностью в зависимости от его объемной концентрации. На рис. 1 (см. также цв. вкл.) изображены поля веществ в области твердого тела до и после корректировки начальных данных. Сплошной линией нанесен реальный контур твердого тела.

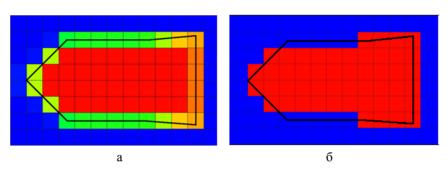


Рис. 1. Поле веществ на момент начала расчета в области твердого тела: а – до корректировки начальных данных, б – после корректировки

При реализации метода BODY-3D в описанный выше алгоритм был добавлен расчет дополнительных величин, связанных с движением твердого тела. Нормальное напряжение, действующее на грань счетной ячейки с ненулевой компонентой вектора нормали  $n_m$  (m означает x, y или z), запишем в виде

$$\sigma_{mm} = \max\{0, P - S_{mm}\},\,$$

где P — давление,  $S_{mm}$  — компонента девиатора тензора напряжений. Компоненты силы сопротивления внедрению, действующей на твердое тело со стороны преграды, вычисляются с помощью формул

$$F_{x} = \sum_{i} f_{x}^{i} = \sum_{i} s_{i} \left[ -\sigma_{xx}^{i} n_{xi} + \frac{V_{x}^{i}}{\left| \overline{V_{i}} \right|} \left( \min \left\{ \mu \sigma_{yy}^{i}, Y_{i} \right\} n_{yi}^{2} + \min \left\{ \mu \sigma_{zz}^{i}, Y_{i} \right\} n_{zi}^{2} \right) \right], \tag{9}$$

$$F_{y} = \sum_{i} f_{y}^{i} = \sum_{i} s_{i} \left[ -\sigma_{yy}^{i} n_{yi} + \frac{V_{y}^{i}}{|\vec{V}_{i}|} \left( \min \left\{ \mu \sigma_{xx}^{i}, Y_{i} \right\} n_{xi}^{2} + \min \left\{ \mu \sigma_{zz}^{i}, Y_{i} \right\} n_{zi}^{2} \right) \right].$$
 (10)

Суммирование здесь выполняется по всем граням счетных ячеек, находящихся на поверхности твердого тела;  $s_i$  – площадь i-й грани;  $n_{xi}$ ,  $n_{yi}$  и  $n_{zi}$  – компоненты вектора нормали к i-й грани;  $Y_i$  – предел текучести вещества преграды. Момент силы относительно центра масс твердого тела вокруг оси z, действующий на него со стороны преграды, определяется с использованием формулы (2) и записывается в виде

$$M_{z} = \sum_{i} \left[ f_{y}^{i} (x_{i} - x_{C}) - f_{x}^{i} (y_{i} - y_{C}) \right], \tag{11}$$

где  $x_i$ ,  $y_i$  — координаты центров граней счетных ячеек;  $x_C$ ,  $y_C$  — координаты центра масс твердого тела.

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Процедура вычисления величин  $F_x$ ,  $F_y$  и  $M_z$  по формулам (9)—(11) выполняется на каждом временном шаге. Для вычисления на n-м шаге по времени угловой скорости вращения твердого тела выражение (4) записывается в конечных разностях ( $\Delta t$  – временной шаг), откуда получается

$$\omega^n = \omega^{n-1} + \frac{M_z^n}{J_C} \Delta t.$$

Теперь рассмотрим изменение аппроксимации уравнения движения среды при реализации метода BODY-3D по сравнению со стандартным подходом, используемым в методике ЭГАК [4]. Как было отмечено, при использовании метода BODY-3D расчет проводится в неинерциальной системе отсчета (x', y', z'), связанной с неподвижным твердым телом. В этом случае массовая скорость среды в расчете является относительной скоростью в неинерциальной система отсчета (x', y', z'). Для ее расчета используется уравнение (6).

Первый член в правой части (6)  $\vec{a}^{\text{отн}}$  является суммой трех слагаемых:

$$\vec{a}^{\text{OTH}} = \vec{a}^{gd} + \vec{a}^{up} + \vec{a}^F$$

Здесь, согласно [4], первые два слагаемых  $\vec{a}^{gd}$  и  $\vec{a}^{up}$  – это стандартные компоненты ускорения в узлах счетных ячеек за счет действия шаровой части и девиатора тензора напряжений. Третье слагаемое  $\vec{a}^F$  является компонентом ускорения в узлах счетных ячеек, возникающим из-за наличия силы сопротивления внедрению, действующей на центр масс твердого тела со стороны преграды. При переходе в систему отсчета, в которой твердое тело покоится, величина  $\vec{a}^F$  с учетом (3) записывается в виде

$$\vec{a}^F = -\vec{i} \, \frac{F_x}{m} - \vec{j} \, \frac{F_y}{m}.$$

Второй член в правой части (6) с точностью до множителя 2 совпадает с кориолисовым ускорением [5]. Обозначим его как

$$\vec{a}^{C} = -\vec{\omega} \times \vec{V}^{\text{OTH}} = -\vec{i} \left( -\omega \right) V_{v}^{\text{OTH}} + \vec{j} \left( -\omega \right) V_{x}^{\text{OTH}}. \tag{12}$$

Массовая скорость вещества на *n*-м шаге по времени записывается в виде

$$\vec{V}_n^{\text{OTH}} = \vec{V}_{n-1}^{\text{OTH}} + \left(\vec{a}^{gd} + \vec{a}^{up} + \vec{a}^F + \vec{a}^C\right) \Delta t. \tag{13}$$

Переносная скорость на n-м шаге по времени определяется по формуле (7):

$$\vec{V}_n^{\text{nep}} = -\vec{\omega}^n \times \vec{r}^{n-1} = -\vec{i} \left( -\omega^n \right) \left( y^{n-1} - y_C \right) + \vec{j} \left( -\omega^n \right) \left( x^{n-1} - x_C \right). \tag{14}$$

Далее вычисляются новые координаты узлов счетных ячеек

изводится стандартным образом [4].

$$x^{n} = x^{n-1} + (V_{x,n}^{\text{OTH}} + V_{x,n}^{\text{nep}})\Delta t, \quad y^{n} = y^{n-1} + (V_{y,n}^{\text{OTH}} + V_{y,n}^{\text{nep}})\Delta t.$$
 (15)

Расчет компоненты массовой скорости относительно оси z и координат узлов вдоль этой оси про-

При использовании метода BODY-3D в расчете в качестве параметров дополнительно задаются коэффициент трения между твердым телом и веществом преграды µ, а также значения

характеристик твердого тела: m — масса твердого тела;  $J_C$  — момент инерции вокруг оси z относительно центра масс твердого тела;  $x_C$ ,  $y_C$  — координаты центра масс твердого тела ( $z_C$  = 0 по умолчанию). Поскольку плоскость xOy является плоскостью симметрии ударника и преграды, то в расчете моделируется половина реальной геометрии (на плоскости xOy ставится граничное условие жесткая стенка). В связи с этим величины m и  $J_C$  рассчитываются для половины реального твердого тела.

# 2. Тестовые расчеты

Задача 1. Свободное падение вращающегося твердого тела на преграду. Рассмотрим компактное твердое тело произвольной формы, расположенное в вакууме на расстоянии L от преграды из упругопластического материала, которая имеет плоскую лицевую поверхность. L является минимальной длиной отрезка, соединяющего точку A на поверхности твердого тела с точкой B на лицевой поверхности преграды и расположенного по нормали к лицевой поверхности преграды. Положим, что ось x параллельна этому отрезку. Пусть преграда расположена в полупространстве x < 0, а ударник в полупространстве  $x \ge 0$ . Твердое тело характеризуется массой m, координатами центра масс  $(x_C, y_C, z_C)$  и моментом инерции  $J_C$  вокруг оси z относительно этого центра. В момент времени t = 0 твердое тело начинает двигаться к преграде по нормали с постоянной поступательной скоростью  $V_x = V_0$ , а также на него начинает действовать постоянный момент силы  $M_z$  вокруг оси z относительно центра масс. На рис. 2 схематично изображена геометрия задачи.

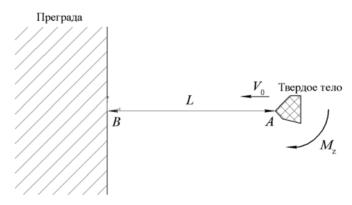


Рис. 2. Геометрия задачи 1

В задаче требуется определить:

- значение  $M_z$ , при котором твердое тело совершит один полный оборот вокруг оси z к моменту его удара о преграду (касания точкой A точки B);
  - траекторию движения точки B в системе координат, в которой твердое тело покоится. Момент времени удара твердого тела о преграду определяется по формуле

$$T_1 = \frac{L}{V_0}. (16)$$

Так как величины  $J_C$  и  $M_z$  не зависят от времени, частоту вращения твердого тела относительно центра масс вокруг оси z можно записать в виде

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

$$\omega = \frac{M_z}{J_C} t.$$

Рассчитаем, каким должен быть момент силы  $M_z$  для того, чтобы ударник совершил один оборот вокруг оси к моменту удара его о преграду, с помощью выражения

$$\int_{0}^{T_{1}} \omega dt = 2\pi. \tag{17}$$

Вычислим интеграл (17) и с учетом формулы (16) запишем выражение для  $M_z$ :

$$M_z = \frac{4\pi J_C V_0^2}{I^2}.$$

Зная  $M_z$ , можно найти момент времени поворота ударника на промежуточный угол  $\gamma$  ( $0 \le \gamma \le 2\pi$ ):

$$t_{\gamma} = \sqrt{\frac{2\gamma J_C}{M_z}}. (18)$$

При  $J_C=1$ ,  $V_0=-0.1$ , L=10 получаем значение  $M_z=0.001256637$ . Для углов поворота твердого тела  $\gamma=\pi/4$ ,  $\pi/2$ ,  $\pi$ ,  $3\pi/2$  значения соответствующих моментов времени составляют  $t_\gamma=35.4$ ; 50; 70.7: 86.6.

Теперь перейдем в систему отсчета, в которой твердое тело покоится. Траекторию точки B можно рассчитать с помощью решения системы уравнений (4)—(8). Для этого необходимо перейти к конечным разностям аналогично (12)—(16) при условии  $\vec{a}^{\text{ отн}}=0$ , так как твердое тело движется в вакууме. Начальные условия для точки B при t=0 записываются в виде  $V_{x,0}^{\text{ отн}}=-V_0$ ,  $V_{y,0}^{\text{ отн}}=0$ ,  $x^0=-L$ ,  $y^0=0$ . На рис. 3 изображены траектории движения точки B при начальных условиях:  $x_C=0.5$ ,  $y_C=0$ ,  $V_0=-0.1$ .

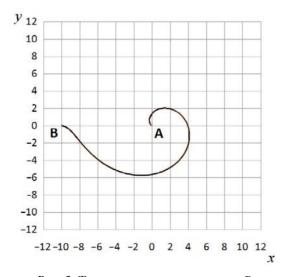


Рис. 3. Траектории движения точки В

Для сокращения времени счета рассматривалась трехмерная задача в плоской постановке (относительно оси z). Использовалась неподвижная кубическая счетная сетка с размером ячейки h=0,05 см. Преграда в плоскости z= const представляла собой квадрат со стороной 2 см. Твердое тело в плоскости z= const представляло собой квадрат со стороной 0,7 см. Ось x проходила через центр квадрата и пересекала два противоположенных угла. Точка B на момент времени t=0 имела координаты (-10,0). Точка A на момент времени t=0 имела координаты (0,0). Скорость преграды на момент времени t=0 составляла  $V_x=V_0=0,1$  км/с. Координаты центра масс брались равными  $x_C=0,5$  см,  $y_C=0$ . К твердому телу прикладывался постоянный момент силы  $M_z=0,001256637\, \Gamma\cdot {\rm cm}^2 / {\left(10\,{\rm mkc}\right)}^2$  относительно оси z. Момент инерции твердого тела брался равным  $J_C=1\, \Gamma\cdot {\rm cm}^2$ , масса —  $m=1\, \Gamma$ . Коэффициент трения полагался нулевым ( $\mu=0$ ).

На рис. 4 показаны положения преграды, полученные в расчете, на моменты времени: а) t=0 ( $\gamma=0$ ), б) t=35,4 ( $\gamma=\pi/4$ ), в) t=50 ( $\gamma=\pi/2$ ), г) t=70,7 ( $\gamma=\pi$ ), д) t=86,6 ( $\gamma=3\pi/2$ ), е) t=100 ( $\gamma=2\pi$ )\*. Сплошной линией нанесена траектория движения точки B, полученная аналитически (см. рис. 3). Моменты времени определены по формуле (18) для заданных углов поворота  $\gamma$  твердого тела вокруг центра масс (отмечен точкой). Получено практическое совпадение результатов расчета с аналитическим решением.

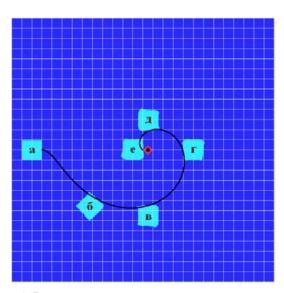


Рис. 4. Результаты расчета и аналитическое решение

Задача 2. Движение твердого тела в грунтовой преграде. В качестве второй тестовой задачи рассматривалась задача о движении малодеформируемого ударника в грунтовой среде при наклонном внедрении. При численном моделировании использовались два подхода. Один расчет был проведен в стандартной постановке, при которой ударник и преграда описывались в приближении сплошной деформируемой среды. В качестве материала ударника в этом случае использовалась прочная сталь. В двух других расчетах для описания ударника применялось приближение твердого тела (использовался метод ВОДУ-3D). Далее результаты соответствующих расчетов сравнивались между собой.

<sup>\*</sup> Время указано в 10 мкс.

Ударник представлял собой однородное поликоническое тело с кавитатором в виде конуса, цилиндрической средней частью и конусообразной стабилизирующей «юбкой». Геометрия ударника (сечение вдоль плоскости симметрии xOy) с номерами угловых точек (их координаты приведены в табл. 1) изображена на рис. 5. Ударник и преграда располагались в вакууме.

Таблица 1 Координаты угловых точек проникателя в задаче 2

№ точки	1	2	3	4	5	6	7
x, cm	5	15	35	49	49	35	15
у, см	0	10	10	12	-12	-10	-10

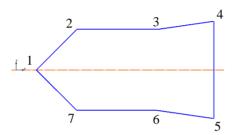


Рис. 5. Геометрия ударника в задаче 2

Скорость соударения составляла  $V_0 = V_x = 2$  км/с. Ось x являлась осью стрельбы. Угол подхода к поверхности преграды составлял  $\theta = 35^\circ$ , угол атаки полагался нулевым ( $\alpha = 0$ ).

Расчеты проводились на кубической неподвижной счетной сетке с размером счетной ячейки h=1 см. В табл. 2 приведены их характеристики. При численном моделировании рассчитывалась половина реальной геометрии задачи: плоскость z=0 являлась плоскостью симметрии. Значение коэффициента трения  $\mu=0,3$  между материалом ударника (сталью) и мягким грунтом в расчете 3 взято из [7]. Для описания мягкого грунта и стали во всех расчетах использовались уравнения состояния в форме Ми – Грюнайзена и приближение идеального упругопластического тела с параметрами из табл. 3.

Характеристики расчетов задачи 2

Таблица 2

Номер	Приближение	$J_C$ ,	т, г	$x_C$ , cm	$y_C$ , cm	
расчета	для описания ударника	$\Gamma \cdot \text{см}^2 / (10 \text{ мкс})^2$	m, 1	AC, CM	ye, cm	μ
1	Сплошная среда	-	_	_	_	_
2	Твердое тело	7663810	50667	31,3	0	0
3	Твердое тело	7663810	50667	31,3	0	0,3

Таблица 3 Параметры для описания грунта и стали в задаче 2

Материал	$ρ_0$ , $Γ/cm^3$	$c_0$ , км/с	n	Γ	$P_{ m OTK}$ , ГПа	<i>Y</i> , ГПа	ν
Грунт	1,72	0,5	9	0	0	0,005	0,3
Сталь	8	4,4	4,65	2	-2,1	2	0,29

В расчете 1 в стандартной постановке в процессе счета накапливались зависимости продольной и поперечной компонент импульса ударника от времени:  $P_x(t)$  и  $P_y(t)$ . С помощью дифференцирования этих зависимостей по времени определялись значения компонент продольного и поперечного ускорения торможения центра масс ударника по формулам

$$a_x = \frac{1}{m} \frac{\Delta P_x}{\Delta t}, \quad a_y = \frac{1}{m} \frac{\Delta P_y}{\Delta t},$$

где m — масса ударника. В этом расчете с помощью визуальной обработки полей плотности определялся угол между осью симметрии ударника и осью стрельбы в зависимости от времени:  $\gamma(t)$ .

В расчетах 2 из 3 с твердым телом зависимость  $\gamma(t)$  определялась по формуле

$$\gamma = \int \omega dt$$
,

где  $\omega$  – частота вращения твердого тела относительно центра масс – рассчитывалась по формуле (4) в процессе счета. Компоненты продольного и поперечного ускорений торможения центра масс твердого тела  $a_x'(t)$  и  $a_y'(t)$  в системе отсчета (x', y', z'), в которой ударник неподвижен, определялись в процессе счета по формулам (3). Для сравнения с результатами расчета в стандартной постановке эти величины пересчитывались в систему отсчета (x, y, z), в которой ударник движется, по формулам

$$a_x = a_x' \cos \gamma + a_y' \sin \gamma$$
,  $a_y = a_y' \cos \gamma - a_x' \sin \gamma$ .

На рис. 6 (см. также цв. вкл.) изображены результаты расчетов на момент времени t=1300 мкс. Рис. 6,6 получен с помощью поворота первоначальной расчетной картины на угол  $\gamma=24^\circ$  по часовой стрелке. Из рисунка видно, что результаты расчетов визуально хорошо совпадают друг с другом: получены каверны с близкими обводами, формы ударных волн в преграде согласуются друг с другом, оба ударника развернулись по часовой стрелке относительно оси стрельбы.

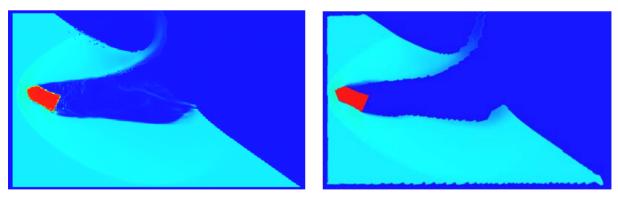


Рис. 6. Поля плотности на момент времени t=1300 мкс: a- расчет 1 (стандартный), 6- расчет 2 (твердое тело,  $\mu=0$ )

На рис. 7 и 8 (см. также цв. вкл.) приведены полученные в расчетах зависимости от времени продольного и поперечного ускорений центра масс ударника, а также угла между осью симметрии ударника и осью стрельбы. Видно, что во всех расчетах получены достаточно близкие результаты.

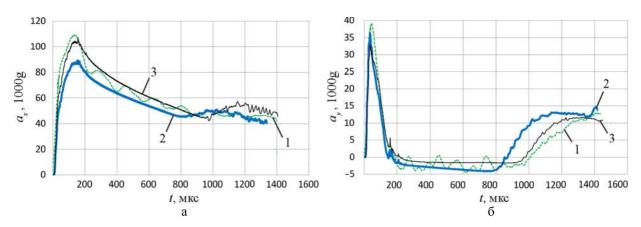


Рис. 7. Зависимости от времени продольного (а) и поперечного (б) ускорения торможения центра масс ударника в расчетах в стандартной постановке и с твердым телом: 1 – расчет 1 (стандартный), 2 – расчет 2 (твердое тело,  $\mu$  = 0), 3 – расчет 3 (твердое тело,  $\mu$  = 0,3)

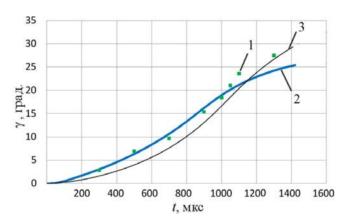


Рис. 8. Зависимости от времени угла между осью симметрии ударника и осью стрельбы в расчетах в стандартной (1) постановке и с твердым телом (2, 3)

Учет силы трения в расчете с твердым телом привел, главным образом, к росту продольной компоненты ускорения торможения центра масс ударника на  $\sim 10-15$  %. Это естественный результат, поскольку при численном моделировании учитывается дополнительная сила, тормозящая ударник, а значение роста согласуется с аналитическими оценками [8].

## Выводы

В методике ЭГАК реализован метод BODY-3D расчета движения твердого тела (ударника) в упругопластической среде (преграде) с учетом силы трения на неподвижной счетной сетке. Данный метод позволяет рассчитывать внедрение в преграду малодеформируемых ударников, используя для их описания приближение абсолютно твердого тела, при подходе под углом  $\theta$  к поверхности преграды с углом атаки  $\alpha$  и нулевым углом скольжения ( $\beta$  = 0). При этом полагается, что ударник имеет плоскость симметрии, перпендикулярную поверхности преграды. Численное моделирование проводится в неинерциальной системе отсчета, связанной с неподвижным ударником.

Для тестирования метода BODY-3D рассмотрены две задачи. Для первой задачи о свободном падении вращающегося твердого тела на преграду получено аналитическое решение. Получено практическое совпадение результатов численного моделирования этой задачи. Во втором тесте рассматривалась задача о движении твердого тела в мягком грунте при наклонном внедрении. При численном моделировании использовались два подхода. В одном случае применялся стандартный подход, при котором ударник описывался в рамках механики деформируемой сплошной среды, в другом – метод BODY-3D. Сравнение результатов расчетов показало их хорошее совпадение друг с другом по всем основным параметрам.

# Список литературы

- 1. Бивин Ю. К., Симонов И. В. Механика динамического проникания в грунтовую среду // Механика твердого тела. 2010. № 6. С. 157–191.
- 2. Silling S. A. CTH Reference Manual: Boundary Layer Algorithm For Sliding Interfaces In Two Dimensions; Report No SAND92–2487. Albuquerque, 1994.
- 3. Scheffler D. R. Modeling non-eroding perforation of an oblique aluminum target using the Eulerian CTH code // Int. J. Impact Eng. 2005. Vol. 32, N 1–4. P. 461–472.
- 4. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Городничев А. В. и др. Комплекс программ ЭГАК++ для моделирования на адаптивно-встраивающейся дробной счетной сетке // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2003. Вып. 1. С. 20–28.
- 5. Сивухин Д. В. Общий курс физики. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1979.
- 6. Li Q. M., Flores-Johnson E. A. Hard projectile penetration and trajectory stability // Int. J. Impact Eng. 2011. Vol. 38. P. 815–823.
- 7. Гердюков Н. Н., Иоилев А. Г., Новиков С. А. Определение динамического коэффициента трения песчаного грунта о жесткую стенку // ПМТФ. 1995. Т. 36, № 4. С. 185-187.
- 8. Сагомонян А. Я. Проникание. М.: МГУ, 1974.

# A Method for the Simulation of a Perfectly Rigid Body Moving in Elastoplastic Medium Using a Fixed Computational Grid

A. A. Krayukhin, Yu. V. Yanilkin, A. L. Stadnik, M. Yu. Eguzhova

The paper suggests the BODY-3D method to simulate the motion of a perfectly rigid body in an elastoplastic medium with regard to friction using an Eulerian computational grid, its implementation in the EGAK code is described and results of test simulations are presented. Two problems were used to test the method. An exact solution was obtained for the first one, the problem of a freely falling rotating rigid body impacting a barrier. The second was the problem of a moving rigid body penetrating into a soft ground at an angle.

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 68 79

# Численное решение двумерного уравнения лучистой теплопроводности методом сглаженных частиц

А. А. Лазарев, С. Н. Полищук, Б. П. Тихомиров

В работе рассматривается численное решение двумерного уравнения лучистой теплопроводности методом сглаженных частиц (SPH). Приведена разностная аппроксимация уравнения для плоского и осесимметричного случаев. Дискретизация уравнения выполняется по неявной разностной схеме с последующей линеаризацией уравнения состояния по Ньютону. Для осесимметричных задач предложен способ проведения вычислений в окрестности оси врашения, основанный на использовании плоского интерполяционного ядра и вспомогательных (фиктивных) частиц. Указан простой алгоритм расчета граничных условий. Представлены результаты расчетов тестовых задач, имеющих аналитическое решение.

# Введение

Метод сглаженных частиц (SPH) [1, 2] является бессеточным лагранжевым методом, развитие которого в первую очередь связано с численным моделированием астрофизических процессов. Одним из таких процессов является перенос энергии излучением. В случае, когда длина свободного пробега фотонов много меньше характерного размера изучаемой системы, хорошим приближением для указанного процесса служит модель лучистой теплопроводности. Она используется во многих важных приложениях, в частности для решения задач тяжелоионного инерциального термоядерного синтеза [3].

Настоящая работа посвящена краткому описанию методики расчета лучистого теплопереноса методом сглаженных частиц [4] и тестированию алгоритмов на задачах, имеющих аналитическое решение.

Рассматривается уравнение теплопроводности в плоской и осесимметричной постановках. Дифференциальное SPH-уравнение аппроксимируется неявной разностной схемой. В осесимметричном случае предлагается использовать плоское интерполяционное ядро сглаживания, для доопределения которого вблизи оси применяется особый алгоритм организации вычислений.

На примере тестовых задач о распространении тепла в однородных и слоистых системах проведена оценка точности численных решений, рассмотрен вопрос о влиянии на точность начальной расстановки частиц.

# Постановка задачи. SPH-уравнение теплопроводности

Рассматривается распространение излучения в ограниченной области  $\Omega$ . Уравнение, описывающее данный процесс в приближении лучистой теплопроводности, для плоского ( $\nu = 0$ ) и осесимметричного ( $\nu = 1$ ) случаев имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r^{\nu}} \frac{\partial}{\partial r} \left( \chi r^{\nu} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right) = Q. \tag{1}$$

Здесь  $\vec{r}=(z,r)$  – координаты; t – время;  $\rho$  – плотность;  $\epsilon$  – удельная внутренняя энергия; T – температура; Q – функция источника (стока);  $\chi$  – коэффициент теплопроводности, который вычисляется по формуле  $\chi=\frac{4}{3}c\sigma\ell T^3$ , где c – скорость света,  $\sigma$  – постоянная Стефана – Больцмана,  $\ell$  – эффективный пробег излучения.

Уравнение (1) дополняется соотношениями

$$\varepsilon = \varepsilon(\rho, T);$$
  $l = l(\rho, T)$  или  $\chi = \chi(\rho, T).$ 

В качестве начальных условий используется заданное распределение температуры, в качестве граничных условий могут быть взяты значение температуры  $T_G(t,\vec{r})$  и заданный поток тепла  $q_G(t,\vec{r})$ .

Для численного решения уравнения (1) применяется метод SPH [1, 2], позволяющий моделировать перенос тепла в сложных неоднородных областях как без учета, так и с учетом движения вещества. В настоящей работе рассматривается теплообмен в неподвижной среде.

Метод сглаженных частиц основан на интегральной интерполяции величин. Базовые интерполяционные формулы для вычисления значения функции  $f(\vec{r})$  и ее градиента в любой точке пространства по значениям в известных точках  $\vec{r}_i$  имеют следующий вид:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho(\vec{r}_{j})} f(\vec{r}_{j}) W(\vec{r} - \vec{r}_{j}, h),$$
 (2)

$$\langle \operatorname{grad} f(\vec{r}) \rangle = \sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho(\vec{r}_{j})} f(\vec{r}_{j}) \operatorname{grad} W(\vec{r} - \vec{r}_{j}, h),$$
 (3)

где m — масса, h — радиус сглаживания, W — интерполяционное (сглаживающее) ядро: grad  $W(\vec{r}-\vec{r}_j,h)=W'(\vec{r}-\vec{r}_j,h)\frac{\vec{r}-\vec{r}_j}{\left|\vec{r}-\vec{r}_j\right|}.$ 

В качестве интерполяционного ядра W используется сплайн третьей степени [5]

$$W(\vec{r} - \vec{r}_j, h) = \frac{1}{N} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}R^2 + \frac{3}{4}R^3, & 0 < R < 1; \\ \frac{1}{4}(2 - R)^3, & 1 \le R < 2; \\ 0, & R \ge 2, \end{cases}$$

где  $R = \left| \vec{r} - \vec{r}_j \right| / h$ ;  $N = 0,7\pi h^2$  для двумерного случая.

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

В двумерной осесимметричной геометрии интерполяционная формула (2) с указанным выше ядром преобразуется к виду

$$\left\langle f\left(\vec{r}\right)\right\rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho_{j} r_{j}} f\left(\vec{r}_{j}\right) W\left(\vec{r} - \vec{r}_{j}, h\right),\tag{4}$$

где  $r_i$  – расстояние до оси симметрии.

Аналогично формуле (3) дифференцирование по пространственным переменным z, r переносится на дифференцирование функции W, и градиент функции  $f(\vec{r})$  принимает вид

$$\left\langle \operatorname{grad} f\left(\vec{r}\right) \right\rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho_{j} r_{j}} f\left(\vec{r}_{j}\right) \operatorname{grad} W\left(\vec{r} - \vec{r}_{j}, h\right).$$
 (5)

С помощью интерполяционных формул (2)—(5) легко получить SPH-представление уравнения теплопроводности для частицы с номером i:

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}\right)_{i} = \sum_{j} \frac{m_{j}}{\rho_{i} \rho_{j}} \left(\frac{1}{2\pi r_{j}}\right)^{\nu} \chi_{j} \nabla T_{j} \nabla W_{ij} + Q_{i}. \tag{6}$$

# Численное решение SPH-уравнения

Каждая частица с номером i может обмениваться энергией с любой окружающей частицей с номером j в пределах двух радиусов сглаживания h. Граница взаимодействия частиц располагается на середине отрезка, соединяющего их геометрические центры (рис. 1).

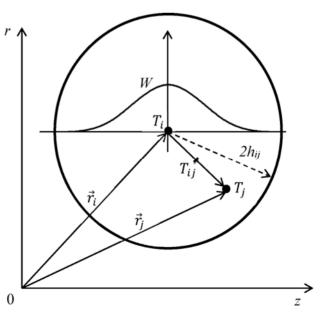


Рис. 1. Схема взаимодействия двух частиц

Пользуясь свойством симметрии интерполяционного ядра, уравнение (6) нетрудно привести к виду

$$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}\right)_{i} = 2\sum_{j} \left(\frac{1}{2\pi} \frac{r_{ij}}{r_{i}r_{j}}\right)^{\nu} \frac{m_{j}}{\rho_{i}\rho_{j}} \chi_{ij} \nabla T_{ij} \nabla W_{ij} + Q_{i}, \tag{7}$$

где  $r_{ij} = \frac{1}{2} (r_i + r_j)$ . Хотя это уравнение идентично уравнению (6), вообще говоря, приближенно для него выполняется закон сохранения энергии. Поэтому в качестве SPH-модели в дальнейшем будем использовать именно уравнение (7).

Заменяя в нем произведение градиентов на производную по направлению, а последнюю – на разностное отношение, получаем следующую динамическую систему:

$$\frac{d\varepsilon_i}{dt} - 2\sum_j \left(\frac{1}{2\pi} \frac{r_{ij}}{r_i r_j}\right)^v \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \chi_{ij} \frac{T_i - T_j}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|} W'_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j, h_{ij}) = Q_i, \quad i = \overline{1, N},$$
(8)

где  $h_{ij} = \alpha (h_i + h_j)$ ,  $\alpha = \frac{1}{2}$ ; N – число частиц.

Коэффициент теплопроводности  $\chi_{ij}$  на границе взаимодействия частиц можно вычислять различными способами [6, 7], в частности по одной из разновидностей модифицированного гармонического усреднения:

$$\chi_{ij} = \frac{\left(\chi_i(\rho_i, T_i) + \chi_i(\rho_i, T_{ij})\right)\left(\chi_j(\rho_j, T_j) + \chi_j(\rho_j, T_{ij})\right)}{\left(\chi_i(\rho_i, T_i) + \chi_i(\rho_i, T_{ij})\right) + \left(\chi_j(\rho_j, T_j) + \chi_j(\rho_j, T_{ij})\right)},$$

где  $T_{ij}$  — температура на границе взаимодействия частиц, определяемая из условия непрерывности температуры и потока.

Неявная аппроксимация дискретного уравнения (8) имеет следующий вид:

$$\varepsilon_{i}^{n+1} - \varepsilon_{i}^{n} = 2\tau \sum_{j} \left( \frac{1}{2\pi} \left( \frac{r_{ij}}{r_{i}r_{j}} \right) \right)^{\nu} \frac{m_{j}}{\rho_{i}\rho_{j}} \chi_{ij}^{n+1} \frac{T_{i}^{n+1} - T_{j}^{n+1}}{\left| \vec{r}_{i} - \vec{r}_{j} \right|} W'_{ij} + \tau Q_{i}, \quad i = \overline{1, N}.$$

В данной системе уравнений присутствуют неизвестные на шаге по времени с номером n+1. Используя линеаризацию уравнения состояния по Ньютону, систему переписываем относительно температуры  $T^{\gamma+1}$  ( $\gamma$  – номер итерации):

$$\varepsilon_{i}^{\gamma} - \varepsilon_{i}^{n} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \Big|_{i}^{\gamma} \left( T_{i}^{\gamma+1} - T_{i}^{\gamma} \right) - 2\tau \sum_{j} \left( \frac{1}{2\pi} \frac{r_{ij}}{r_{i} r_{j}} \right)^{\nu} \frac{m_{j}}{\rho_{i} \rho_{j}} \chi_{ij}^{\gamma} \frac{T_{i}^{\gamma+1} - T_{j}^{\gamma+1}}{\left| \vec{r}_{i} - \vec{r}_{j} \right|} W_{ij}' = \tau Q_{i}.$$

$$(9)$$

$$\varepsilon_i^{\gamma}\Big|_{\gamma=0} = \varepsilon_i^n, \quad T_i^{\gamma}\Big|_{\gamma=0} = T_i^n,$$
 (10)

Итерационный процесс завершается при выполнении для всех i неравенства

$$\left|T_i^{\gamma+1}-T_i^{\gamma}\right|<\varepsilon_{\text{OTH}}\left|T_i^{\gamma}\right|+\varepsilon_{\text{afc}},$$

где  $\, \epsilon_{\rm oth} = \! 10^{-4} \,$  и  $\, \epsilon_{\rm aбc} = \! 10^{-8} \,$  — соответственно значения относительной и абсолютной погрешностей.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Шаг по времени выбирается следующим образом:

$$\tau^{n+1} = \min\left\{1, 2\tau^n, \tau_{\text{табл}}\right\},\,$$

где  $\tau^n$  — предыдущее значение шага,  $\tau_{\text{табл}}$  — заданное таблично максимальное значение шага по времени.

В методе SPH некоторые трудности возникают при практической реализации граничных условий. Укажем простой способ расчета для случая, когда в плоскости (z,r) границами являются прямые линии, ортогональные осям координат. Для определенности будем рассматривать правую границу  $z = z_{\rm rp}$  расчетной области (рис. 2).

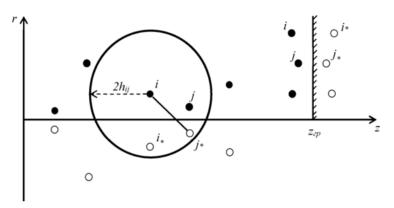


Рис. 2. Счетные (●) и фиктивные (●) частицы

Введем дополнительные (фиктивные) частицы. Они симметричны относительно границы и добавляются, если частица i лежит в приграничной полосе шириной  $\tilde{h}$ . Заметим, что в случае неподвижной среды можно взять, например,  $\tilde{h}=h$ .

Фиктивная частица  $i_*$  имеет координаты  $z_{i_*}=2z_{\rm rp}-z_i$ ,  $r_{i_*}=r_i$ . В зависимости от типа граничного условия в ней ставится либо заданная температура  $T_{i_*}=T_G(t^{n+1},\,z_{\rm rp},r_i)$ , либо заданное значение потока  $q_i=q_G(t^{n+1},\,z_{\rm rp},r_i)$ .

По постановке задачи граница может быть плоскостью симметрии. Тогда в фиктивные частицы переносятся значения температуры из соответствующих родительских частиц:  $T_{i*} = T_i$ .

Отметим, что, если на границе ставится условие симметрии или задана температура, суммирование в формуле (9) осуществляется по всем находящимся в области действия ядра сглаживания  $(W_{ij} \neq 0)$  частицам, включая фиктивные.

Иначе обстоит дело, когда задан поток. В этом случае из множества потоковых фиктивных частиц берется только частица  $j=i_*$ . Остальные потоковые частицы не учитываются, и слагаемое под знаком суммы в формуле (9), «отвечающее» за взаимодействие частицы i с частицей  $i_*$ , принимает вид

$$\left(\frac{1}{2\pi}\frac{1}{r_i}\right)^{\nu}\frac{m_j}{\rho_i^2}W'_{ii*}q_G.$$

Рассмотрим один из способов расчета окрестности оси вращения в осесимметричных задачах.

Формально расширим координатную полуплоскость  $(-\infty < z < +\infty, 0 < r < +\infty)$  до всей плоскости и построим в нижней полуплоскости (r < 0) фиктивные частицы  $i_*$  с координатами  $(z_i, -r_i)$ . Каждой фиктивной частице присвоим все параметры родительской частицы, включая текущее значение температуры.

Вычисления проводим по формуле (9) с небольшим изменением, а именно слагаемое под знаком суммы, отвечающее за взаимодействие частицы i с фиктивной частицей  $j_*$ , берем в виде

$$\frac{1}{2\pi} \left( \frac{r_{ij_*}}{r_i \left| r_{j_*} \right|} \right) \frac{m_{j_*}}{\rho_i \rho_{j_*}} \chi_{ij_*}^{\gamma} W_{ij_*}' (\vec{r_i} - \vec{r}_{j_*}, h_{ij_*}) \frac{T_i^{\gamma+1} - T_{j_*}^{\gamma+1}}{\left| \vec{r_i} - \vec{r}_{j_*} \right|} \quad \text{при} \quad r_{ij_*} = \frac{1}{2} \left( r_i + \left| r_{j_*} \right| \right).$$

Итак, установлено, что если некоторые элементы границы расчетной области принадлежат плоскости симметрии или оси вращения, то в системе линейных алгебраических уравнений (9) появляются дополнительные неизвестные функции – температуры фиктивных частиц. Поэтому, чтобы замкнуть систему без ее расширения, температуры фиктивных частиц заменяются на температуры соответствующих родительских частиц. В результате число уравнений в системе не увеличивается и, естественно, совпадает с числом счетных частиц.

## Результаты тестовых расчетов

Ниже приводятся результаты расчетов ряда задач, имеющих аналитические решения.

Коэффициент теплопроводности пересчитывается только на первых двух нелинейных итерациях, а затем фиксируется [8]. Система уравнений (9), (10) на каждой итерации решается с использованием библиотеки решателей LParSol [9] по методу сопряженных градиентов с предобуславливанием по блочному методу Якоби. Источник Q в (9) вычисляется на шаге по времени с номером n.

Задача 1. Распространение тепла от постоянно действующего источника. Рассматривается задача [10] распространения сферической тепловой волны от постоянного действующего источника  $Q(t,T)=\frac{3}{2}\frac{T}{t}$ . Уравнение состояния  $\varepsilon=c_vT$ ,  $c_v=1$ . Коэффициент теплопроводности  $\chi=T^\sigma$ ,  $\sigma=4$ . Плотность среды  $\rho=1$ .

Аналитическое решение данной задачи имеет следующий вид [10]:

$$T(r,t) = 1,21921 \cdot \left(1 - \left(\frac{r}{r_{\phi}}\right)^2\right)^{0,25}$$

где  $r_{\Phi} = 1,48647\sqrt{t}$  — радиус фронта тепловой волны.

Задача решалась в осесимметричной постановке. Область представляет собой квадрат  $0 \le z$ ,  $r \le 2,5$ . Расстановка частиц выполнялась равномерно, число частиц вдоль осей было взято одинаковым. Радиус сглаживания задан постоянным:  $h = 1,5d_0$ , где  $d_0$  – расстояние между частицами. В частицах, расположенных в квадрате  $0 \le z$ ,  $r \le 0,1$ , задана средняя начальная температура  $T_0 = 1,1629541$ , в остальных частицах температура равна нулю.

Расчеты проводились с начального момента времени t = 0,0069666 до момента времени t = 1,5. Начальный шаг по времени задан равным  $10^{-5}$ , максимальный шаг по времени  $7,5 \cdot 10^{-5}$ .

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Было сделано три расчета с числом частиц вдоль каждой из осей, равным 50, 100 и 200 соответственно.

На рис. 3 (см. также цв. вкл.) представлено распределение температуры на конечный момент времени в расчете с числом частиц вдоль осей, равным 50. На рис. 4 показано распределение температуры вдоль оси Or.

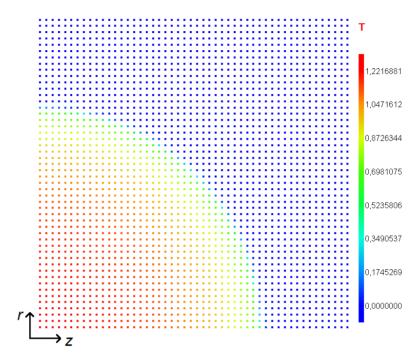
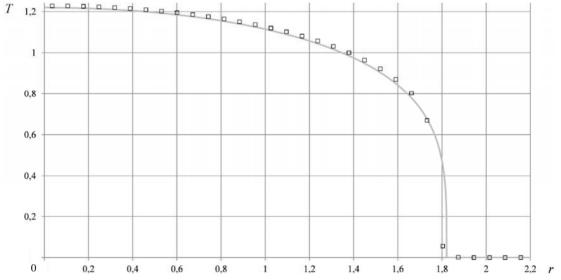


Рис. 3. Задача 1. Распределение температуры на конечный момент времени



Погрешность численного решения в норме L1 в расчетах с числом частиц вдоль осей 50, 100 и 200 составила соответственно  $1,04\cdot10^{-2},\,5,05,10^{-3}$  и  $2,17\cdot10^{-3}$ , в норме  $L2-4,14\cdot10^{-2},\,2,83\cdot10^{-2}$  и  $1,89\cdot10^{-2}$ , в норме  $C-3,56\cdot10^{-1},\,3,26\cdot10^{-1}$  и  $3,00\cdot10^{-1}$ .

Задача 2. Распространение тепловой волны в слоистой системе. Рассматривается плоская одномерная задача о бегущей тепловой волне в слоистой системе: в первом слое [0; 10]  $\rho = 1$ ,  $\chi = 100T^5$ ,  $\varepsilon = T$ ; во втором слое [10; 10,6]  $\rho = 20$ ,  $\chi = 5T^5$ ,  $\varepsilon = T$ . На левой границе задана температура  $T(t) = \left(\frac{t}{20}\right)^{0,2}$ , на правой – равный нулю поток тепла.

Аналитическое решение данной задачи имеет следующий вид:

$$- \text{ в первом слое } T(z,t) = \begin{cases} \left(\frac{t-z}{20}\right)^{0,2}, & \text{если } t-z>0; \\ 0, & \text{если } t-z\leq0; \end{cases}$$
 
$$- \text{ во втором слое } T(z,t) = \begin{cases} \left(\frac{t-10-20\left(z-10\right)}{20}\right)^{0,2}, & \text{если } t-20z > -190; \\ 0, & \text{если } t-20z \leq -190. \end{cases}$$

Решение однообластной задачи приведено в работе [11].

Задача считалась в плоской двумерной постановке. Расчетная область представляет собой прямоугольник со сторонами по оси Oz [0; 10,6] и по оси Or [0; 0,3]. Было сделано три расчета. Расстановка частиц по слоям выполнялась равномерно с числом частиц вдоль оси Oz: 1) в первом слое 50, во втором – 60; 2) в первом слое 100, во втором – 120; 3) в первом слое 200, во втором – 240. Радиус сглаживания задан постоянным:  $h = 1,5d_0$ , где  $d_0$  – расстояние между частицами.

Расчеты проводились до момента времени t = 20. Начальный шаг по времени задан равным  $10^{-5}$ , максимальный шаг по времени равен  $10^{-4}$ .

На рис. 5 показано распределение температуры в расчете с числом частиц вдоль оси Oz, равным 440.

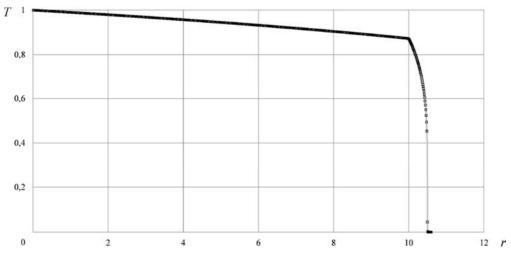


Рис. 5. Задача 2. Распределение температуры вдоль оси Oz:

— – аналитическое решение, п – численное решение

Погрешность численного решения в норме L1 в расчетах с числом частиц 110, 220 и 440 вдоль оси Oz составила соответственно 4,83·10<sup>-3</sup>, 1,43·10<sup>-3</sup> и 3,04·10<sup>-4</sup>, в норме L2 –2,78·10<sup>-2</sup>, 1,25·10<sup>-2</sup> и 4,87·10<sup>-3</sup>, в норме C – 4,93·10<sup>-1</sup>, 3,72·10<sup>-1</sup> и 2,58·10<sup>-1</sup>.

**Задача 3. Распространение тепла от объемного источника.** Рассматривается задача [12] распространения сферической и цилиндрической тепловых волн от постоянного действующего источника. Область представляет собой прямоугольник  $0 \le r \le 1,1$ ;  $-1,1 \le z \le 1,1$ . Уравнения состояния и коэффициент теплопроводности заданы следующим образом:

$$\varepsilon = \begin{cases} T^{1,5}, & z \le 0; \\ T, & z > 0; \end{cases} \quad \chi = \begin{cases} T^{4,5}, & z \le 0; \\ T^4, & z > 0. \end{cases}$$

Плотность среды  $\rho = 1$ . Фоновое значение температуры  $T_{\phi} = 10^{-8}$ .

В начальный момент времени  $t_0 = 0,0004$  задана температура

$$T_0 = \begin{cases} 0,57908, & -0,02 \le z \le 0, & 0 \le r \le 0,02; \\ 0,8 & 0 \le z \le 1,1, & 0 \le r \le 0,02. \end{cases}$$

Функция источника имеет следующий вид:

$$F(z,r,t) = \begin{cases} 1,5\frac{T^{1,5}}{t}, & z < 0; \\ \frac{T}{t}, & z > 0. \end{cases}$$

Аналитическое решение данной задачи имеет следующий вид [12]:

$$T(r,t) = \left(1 - \frac{r^2}{t}\right)^{0.25}$$
, где  $r = \begin{cases} \sqrt{z^2 + r^2}, z < 0; \\ r, z \ge 0. \end{cases}$ 

Расстановка частиц выполнялась двумя способами: равномерно и хаотично.

Равномерная расстановка выполнялась с шагами, равными 0,02; 0,04 и 0,08. Было получено соответственно 6050, 24200 и 96800 частиц.

Хаотичная расстановка выполнялась по следующему алгоритму. В области равномерно с шагом  $\Delta = 0,0285$  расставляются точки. Далее выполняется случайное их смещение на расстояние до  $0,75\Delta$ . При этом в окрестности оси  $0 \le r \le 0,02$ , где задан источник, равномерная расстановка сохраняется. Исходя из полученного набора частиц, выполняется триангуляция области по алгоритму Делоне [13]. Далее каждый построенный треугольник объявляется частицей, расположенной в его центре масс. Число частиц составило 6032.

Радиус сглаживания частиц вычислялся так, чтобы гарантировать число «соседей» для частиц  $N_s = 25$ . В работе [14] предложена следующая итерационная формула:

$$h_i^{\theta+1} = \frac{1}{2} h_i^{\theta} \left[ 1 + \left( \frac{N_s}{N_i^{\theta}} \right)^{1/2} \right]; \quad h_i^{\theta} \Big|_{\theta=0} = h_i^n,$$
 (11)

где  $\theta$  – номер итерации,  $N_i$  – текущее число соседних частиц.

Максимальное число итераций в (11) было задано равным 5. В качестве условия завершения итераций использовалось ограничение на максимальное значение  $N_s/N_i \cdot 100 \%$  по всем частицам, заданное равным 10 %.

Расчеты проводились до момента времени t = 1. Начальный шаг по времени задан равным  $10^{-5}$ , максимальный шаг по времени равен 7,5· $10^{-5}$ .

На рис. 6 (см. также цв. вкл.) представлено распределение температуры на конечный момент времени. На рис. 7 показано распределение температуры вдоль оси Or в расчетах с равномерной и хаотичной расстановками частиц.

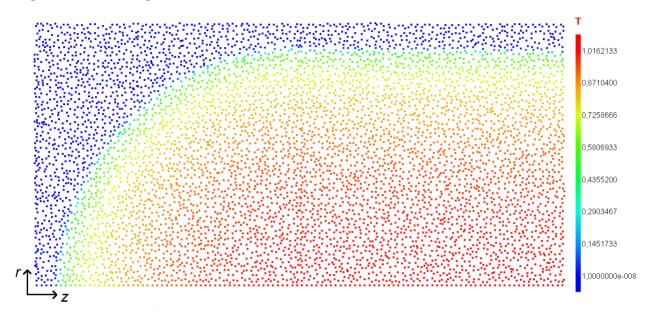


Рис. 6. Задача 3. Распределение температуры на конечный момент времени

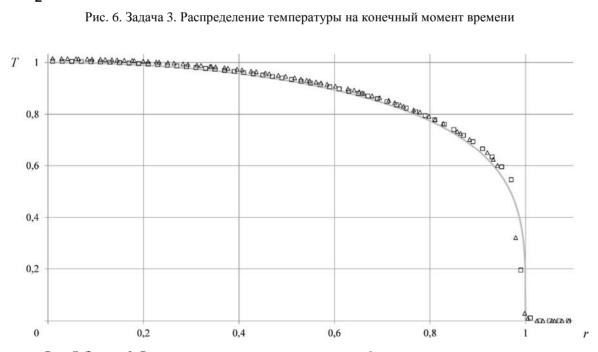


Рис. 7. Задача 3. Распределения температуры вдоль оси *Or*: — – аналитическое решение, □ – равномерная расстановка частиц, △ – хаотичная расстановка частиц

Погрешность численного решения в норме L1 в расчетах с равномерной расстановкой частиц при числе частиц 6050, 24200 и 96800 составила соответственно 1,55·10<sup>-2</sup>, 7,59·10<sup>-3</sup> и 3,77·10<sup>-3</sup>, в норме  $L2-3,56\cdot10^{-2}$ , 2,17·10<sup>-2</sup> и 1,29·10<sup>-2</sup>, в норме  $C-3,59\cdot10^{-1}$ , 3,06·10<sup>-1</sup> и 2,59·10<sup>-1</sup>. Погрешность численного решения при хаотичной расстановке частиц с числом частиц 6032 в норме L1 составила 1,84·10<sup>-2</sup>, в норме  $L2-4,24\cdot10^{-2}$ , в норме  $C-3,96\cdot10^{-1}$ .

### Заключение

В работе изложена методика численного решения задач теплопроводности методом сглаженных частиц в двумерной плоской и осесимметричной постановках. Проведена ее апробация на примере решения задач о распространении тепла в однородных и слоистых системах. Получено хорошее согласие численных и аналитических решений. Показана сходимость решения по числу частиц. Установлено, что хаотичное расположение частиц не оказывает существенного влияния на точность численного решения.

## Список литературы

- 1. Gingold R. A., Monaghan J. J. Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 1977. Vol. 181. P. 375–389.
- 2. Lucy L. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis // Astronom. J. 1977. Vol. 82. P. 1013.
- 3. Софронов И. Д., Тихомиров Б. П., Блажнов С. В. и др. Приближенные методы расчета лучистого энергопереноса в оптических неоднородных областях сложной формы // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1999. Вып. 4. С. 68–75.
- 4. Brookshaw L. A method of calculating radiative heat diffusion in particle simulations // Proc. ASA. 1986. Vol. 6(2). P. 207–210.
- 5. Monaghan J. J. Smoothed particle hydrodynamics // Annual Rev. of Astronomy and Astrophysics. Clayton, 1992. P. 543–574.
- 6. Дмитриев Н. А., Софронов И. Д., Тихомиров Б. П. Методика расчета одномерных многообластных задач высокотемпературной газовой динамики // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач матем. физики. 1983. Вып. 3. С. 3–8.
- 7. Авдошина Е. В., Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А. и др. Исследование точности различных методов усреднения коэффициента теплопроводности на стороне ячейки интегрирования при численном решении уравнения теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2014. Вып. 3. С. 32–46.
- 8. Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А. Практические условия устойчивости для счета тепловых волн в неявных разностных схемах // Там же. 2008. Вып. 4. С. 3–12.
- 9. Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Карпов А. П. и др. Комплекс библиотек параллельных решателей СЛАУ LParSol версии 3 // Сб. докл. XIV Международ. конф. «Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах». Пермь: ПНИПУ, 2014. С. 49–53.

### ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ЛУЧИСТОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ...

- 10. Тихомиров Б. П. Автомодельные тепловые волны от сосредоточенного или объемного источника в среде с неоднородными теплофизическими параметрами // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2010. Вып. 2. С. 40–50.
- 11. Самарский А. А., Соболь И. М. Примеры численного расчета температурных волн // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 1963. Т. 3. Вып. 4. С. 702–719.
- 12. Певная П. И., Тихомиров Б. П. Тепловые волны от сосредоточенных и объемных источников в двумерных осесимметричных и плоских областях // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2011. Вып. 1. С. 40-48.
- 13. Скворцов А. В. Триангуляция Делоне и ее применение. Томск: Из-во Томского университета, 2002.
- 14. Hernquist L., Katz N. TreeSPH: A unification of sph with the hierarchical tree method, The Astrophysical J. Supplements Series. 1989. Vol. 70. P. 419–446.

# Numerical Solution of the 2D Radiative Heat Transfer Equation Using SPH Method

A. A. Lazarev, S. N. Polischuk, B. P. Tikhomirov

The numerical solution of the 2D radiative heat transfer equation using smoothed-particle hydrodynamics (SPH) is considered. The difference approximation to the equation is given for the planar and axially symmetric problems. The equation discretization is performed using an implicit difference scheme with further linearization of the equation according to Newton. For problems with axial symmetry, the paper offers the method of performing calculations in the vicinity of rotation axis, which is based on the use of a planar interpolation kernel and auxiliary (fictitious) particles. A simple algorithm of simulating boundary conditions is given. Simulation results are presented for some test problems having known exact solutions.

УДК 519.245

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 80 87

# Alias-метод для моделирования таблично заданных распределений случайных величин

Рассмотрен Alias-метод моделирования таблично заданных распределений случайных величин. Приведен оригинальный алгоритм предварительной обработки таблиц. Представлены формулы для моделирования многомерных таблично заданных распределений: дискретного, кусочно-линейного и кусочно-постоянного.

А. Н. Залялов

### Введение

Для моделирования энергетического, углового и пространственного распределений источника частиц или его энергии в методиках переноса частиц обычно используются три типа табличного задания этих распределений: дискретное, кусочно-линейное и кусочно-постоянное, заданное либо гистограммой, либо в виде доли частиц в каждом интервале. В качестве основного шага моделирования таких распределений традиционно используется стандартный метод моделирования случайных величин [1], который заключается в следующем.

Пусть дискретное распределение случайной величины  $\xi$  задано таблицей, содержащей ее значения  $x_1,...,x_n$  и соответствующие вероятности  $p_1,...,p_n$ ; n — длина таблицы. Пусть  $\eta$  — слу-

чайная величина, равномерно распределенная на отрезке [0,1]. Тогда если  $\sum_{k=1}^m p_k \le \eta < \sum_{k=1}^{m+1} p_k$ ,

$$m = \overline{1, n-1}, \sum_{k=1}^{n} p_k = 1$$
, то выбирается значение случайной величины  $\xi = x_m$ .

Отсюда следует, что при больших значениях n на выборку значения случайной величины  $\xi$  может тратиться значительное время, растущее пропорционально n. При этом основное время тратится на вычисление суммы  $\sum_{k=1}^{m} p_k$ .

В монографии [1] рассматриваются примеры распределений, в которых для сокращения времени вычислений изменяется порядок вычисления сумм. В методике С-007 [2] и в книге [3] для этой цели используется метод деления отрезка пополам. В этом методе с ростом n время выборки растет как  $\log_2 n$ .

Если бы все  $p_k$  были равны 1/n, то выборку случайного значения  $\xi$  можно было бы определить по формуле  $\xi = x_{[n\eta]+1}$ . Очевидно, что время выборки в данном случае не зависит от n.

В данной работе рассматривается Alias-метод, который по сравнению со стандартным методом обладает существенным преимуществом при моделировании распределений, заданных таблицами большой длины.

### Alias-метод

В работах 1970-х гг. [4, 5] Уолкер предложил оригинальный метод для выборки значения случайной величины из дискретного распределения с разными вероятностями, по скорости не уступающий методу выборки из дискретного распределения с равными вероятностями. Позже этот метод был независимо заново открыт Брауном, Мартином и Калаханом, назван Aliasметодом и применен для выборки значений случайных величин из дискретных распределений в программе моделирования методом Монте-Карло переноса частиц [6]. После этого, хотя Aliasметод широко не использовался, он был распространен на непрерывные распределения [7–9].

Суть Аlіаs-метода состоит в замене традиционной схемы выборки номера m на выборку этого номера из специально построенного распределения. Построение такого распределения называется приведением распределения к Alіas-формату. В Alіas-формате все n вероятностей распределения одинаковы и равны  $p_m + \tilde{p}_{m^*} = 1/n$ , где каждый элемент распределения с номером m состоит из двух частей: остатка исходной части  $p_m$  и донорского дополнения  $\tilde{p}_{m^*}$ . Примеры исходного и Alias-формата дискретного распределения вероятностей из четырех элементов приведены на рис. 1 (см. также цв. вкл.). Если в ходе приведения к Alіas-формату вероятность донорского элемента станет меньше 1/n, то для него будет определен свой донор (см. элемент 3 на рис.  $1,\delta$ ). Донор допускается только один. Донорские дополнения на рис.  $1,\delta$  размещены в верхних частях столбцов гистограммы и имеют цвета донорских элементов (см. рис. 1,a). Внизу показаны остатки исходных частей элементов. Числами указаны соответствующие значения вероятностей. Для выборки значения случайной величины в Alias-методе нужно хранить для каждого элемента распределения значение  $p_m n$  и номер  $m^*$  донорского элемента.

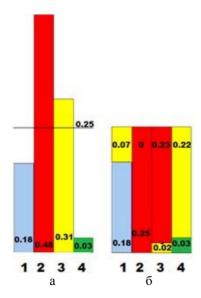


Рис. 1. Пример представлений распределения случайной величины: a-в исходном формате,  $\delta-в$  Alias-формате

## Алгоритм приведения распределения к Alias-формату

Рассмотрим теперь алгоритм приведения распределения к Alias-формату. Данный алгоритм был предложен и реализован автором в 2000 г. В 2011 г. вышла книга С. М. Ермакова [3] с описанием метода Уолкера [9], однако алгоритмов в ней не содержится.

Рассмотрим распределение вероятностей  $\sum_{m=1}^{n} p_m = 1$  и упорядочим его по возрастанию зна-

чений  $p_m$ . Выравнивать вероятности будем по значению c = 1/n. Определяем разность  $c - p_m$ , где  $m_1$  – номер первого элемента с минимальной вероятностью. Если эта разность положительна (она может быть равной нулю!), то, начиная со следующего элемента, ищем донора, обеспечивающего донорское дополнение до значения с. При этом вероятность донора уменьшается на  $c - p_{m_1}$ . Запомнив номер донора и исключив элемент с номером  $m_1$  из рассмотрения, повторяем данный алгоритм для оставшихся n-1 элементов.

Проиллюстрируем данный алгоритм на примере.

Пусть есть дискретное распределение вероятности из четырех элементов (n = 4), заданное в виде гистограммы (см. рис. 1,а и табл. 1). После упорядочения данных таблицы по возрастанию вероятности случайной величины получим табл. 2. В результате последовательного поиска донорского дополнения для каждого элемента, имеющего  $p_m < 0.25$ , получим табл. 3. На последнем шаге вернем таблицу к исходной последовательности элементов и рассчитаем для каждого элемента значение  $p_m n$  и номер донора  $m^*$  (табл. 4).

Заданное распределение случайной величины

Исходный номер элемента т	1	2	3	4
Вероятность р	0.18	0.48	0.31	0.03

Таблица 1

Упорядоченная по возрастанию вероятности таблица распределения случайной величины

Исходный номер элемента т	4	1	3	2
Вероятность $p_m$	0,03	0,18	0,31	0,48

Таблица 3 Упорядоченная по возрастанию таблица с донорскими дополнениями

Исходный номер элемента т	4	1	3	2
Номер донорского элемента $m^*$	3	3	2	0
Вероятность донорского дополнения	0,22	0,07	0,23	0
Вероятность остатка исходной части	0,03	0,18	0,02	0,25

Таблица 4 Данные в Alias-формате

Номер элемента т	1	2	3	4
Номер донора $m^*$	3	0	2	3
$p_m n$	0,72	1	0,08	0,12

Таким образом, данные приведены к Alias-формату и рассчитаны массивы  $p_m n$  и  $m^*$ .

## Алгоритмы моделирования случайной величины в Alias-формате

**Дискретное распределение.** Рассмотрим сначала базовый алгоритм выборки номера m для дискретного распределения, уже приведенного к Alias-формату. Он состоит в следующем:

- 1. Разыгрываем две равномерно распределенные на отрезке [0, 1] случайные величины  $\varsigma$  и  $\eta$ .
- 2. Полагаем  $m = [n\varsigma] + 1$ .
- 3. Если  $\eta \le p_m n$ , то выбираем номер m, иначе берем номер донора  $m = m^*$ .

Из алгоритма Alias-метода видно, что по скорости выполнения он сравним с алгоритмом выборки из дискретного распределения с равными вероятностями. Его эффективность по сравнению с традиционными методами повышается с увеличением размера выборки n, поскольку для Alias-метода время выборки не зависит от n, а, как отмечалось выше, в наиболее быстрых традиционных методах оно растет как  $\log_2 n$ .

Необходимо отметить перспективы использования Alias-метода на векторных ЭВМ, так как он теоретически позволяет всем процессам одновременно исполнять один и тот же код.

**Кусочно-линейное распределение.** По мнению американских авторов [8, 9], распространение Alias-метода на кусочно-линейные распределения сдерживалось до тех пор, пока не был обнаружен оригинальный метод моделирования случайных величин, имеющих кусочно-линейную плотность распределения. Этот метод был, по-видимому, впервые предложен в 1981 г. Андросенко и Поповым [10]. Американским авторам он стал известен в 1989 г. [8, 9].

Рассмотрим кратко этот метод.

Ненормированную кусочно-линейную плотность распределения случайной величины x можно задать графически (рис. 2) или таблицей, содержащей значения  $x_0, x_1, x_1, x_2, x_2, ..., x_{n-1}, x_{n-1}, x_n$  и соответствующие значения  $f_0, f_{1l}, f_{1r}, f_{2l}, f_{2r}, ..., f_{(n-1)l}, f_{(n-1)r}, f_n$ , где  $f_{ml}, f_{mr}$  ( $m = \overline{1, n-1}$ ) — соответственно левое и правое значения кусочно-линейной плотности распределения в точке разрыва  $x_m$ .

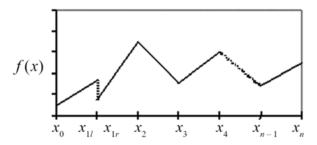


Рис. 2. Случайная величина, заданная ненормированной кусочно-линейной плотностью распределения

После вычисления и нормировки вероятностей  $p_m = \frac{1}{2} \Big( f_{(m-1),r} + f_{ml} \Big) \big( x_m - x_{m-1} \big)$  мы получим таблицу, аналогичную табл. 1, и, применив базовый Alias-алгоритм выборки, найдем номер m и соответствующий ему отрезок  $\big[ x_{m-1}, \, x_m \big]$ , который содержит смоделированное значение  $\xi$  случайной величины.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Для вычисления случайной величины  $\xi$  Андросенко и Попов предложили следующую формулу:

$$\xi = \begin{cases} \varsigma, & \eta \le f(\varsigma); \\ x_{m-1} + x_m - \varsigma, & \eta > f(\varsigma). \end{cases}$$
 (1)

Здесь  $\varsigma$  и  $\eta$  — независимые случайные величины, причем случайная величина  $\varsigma$  равномерно распределена на отрезке  $\left[x_{m-1}, \frac{x_{m-1} + x_m}{2}\right]$ , а случайная величина  $\eta$  равномерно распределена на отрезке  $\left[0, f\left(x_{m-1}\right) + f\left(x_m\right)\right]$ ;

$$f(\varsigma) = f(x_{m-1}) + \frac{f(x_m) - f(x_{m-1})}{x_m - x_{m-1}} (\varsigma - x_{m-1}).$$

В работах [8, 9] приведена другая формула для вычисления случайной величины ξ:

$$\xi = \begin{cases} (1-\varsigma)x_{m-1} + \varsigma x_m, & \text{если } (f(x_{m-1}) + f(x_m))\eta \le (1-\varsigma)f(x_{m-1}) + \varsigma f(x_m), \\ \varsigma x_{m-1} + (1-\varsigma)x_m, & \text{если } (f(x_{m-1}) + f(x_m))\eta > (1-\varsigma)f(x_{m-1}) + \varsigma f(x_m), \end{cases}$$
(2)

где независимые случайные величины  $\zeta$  и  $\eta$  равномерно распределены на отрезке [0, 1]. В данной записи случайной величины  $\xi$  присутствуют элементы стохастической интерполяции аргумента  $(1-\zeta)x_{m-1} + \zeta x_m$  и функции  $(1-\zeta)f(x_{m-1}) + \zeta f(x_m)$ , что удобно для обобщения на многомерный случай.

В работах [8, 9] авторами заявлено, что вычисление по формулам (1), (2) требует меньших затрат машинного времени, чем по существовавшему ранее методу, основанному на решении квадратного уравнения.

**Кусочно-постоянное распределение.** Рассмотрим теперь использование Alias-метода для кусочно-постоянного распределения, заданного либо гистограммой, либо в виде ненормированной доли частиц в каждом интервале (рис. 3).

Здесь  $x_0, x_1, ..., x_n$  — значения аргумента;  $h_1, h_2, ..., h_n$  — значения ненормированной кусочно-постоянной плотности распределения, представленной в виде гистограммы;  $p_1, p_2, ..., p_n$  — значения ненормированной вероятности того, что фазовая координата частицы находится в определенном интервале.

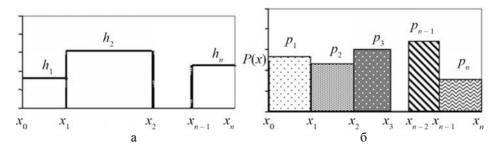


Рис. 3. Случайная величина, заданная ненормированной кусочно-постоянной плотностью распределения в виде гистограммы (а) или долей частиц в определенных интервалах (б)

После вычисления вероятностей  $p_m = h_m \left( x_m - x_{m-1} \right)$  они нормируются, чтобы была получена таблица, аналогичная табл. 1. Применив базовый Alias-алгоритм выборки, находим номер m и соответствующий ему отрезок  $\left[ x_{m-1}, x_m \right]$ , которому будет принадлежать смоделированное значение  $\xi$  случайной величины, вычисляемое по формуле  $\xi = x_{m-1} + \eta (x_m - x_{m-1})$ , где  $\eta$  – равномерно распределенная на отрезке [0, 1] случайная величина.

## Обобщение Alias-метода для многомерных распределений

Иногда при моделировании энергетического, углового и пространственного распределений источника частиц требуется задать совместное двумерное или трехмерное распределение из перечисленных выше распределений. Поэтому рассмотрим, как с помощью Alias-метода можно моделировать многомерное распределение  $P(x_1, x_2, ..., x_n)$ .

Сначала многомерное распределение переводится в одномерное путем следующего преобразования номеров элементов:

$$k = i_1 + (i_2 - 1)l_1 + (i_3 - 1)l_1l_2 + ... + (i_n - 1)l_1l_2...l_{n-1}.$$

Здесь  $i_m = 1,...,l_m, (m = \overline{1,n}), l_m$  — длина таблицы распределения по направлению измерения m.

Затем номер k разыгрывается с помощью базового Alias-метода и выполняется обратное преобразование номеров:

$$\begin{split} &i_n = \left[\frac{k-0.5}{l_1 l_2 ... l_{n-1}}\right] + 1; \\ &i_{n-1} = \left[\frac{k-0.5}{l_1 l_2 ... l_{n-2}}\right] - l_{n-1} (i_n - 1) + 1; \\ &\vdots \\ &i_2 = \left[\frac{k-0.5}{l_1}\right] - l_2 l_3 ... l_{n-1} (i_n - 1) - l_2 l_3 ... l_{n-2} (i_{n-1} - 1) - ... - l_2 (i_3 - 1) + 1; \\ &i_1 = k - l_1 l_2 ... l_{n-1} (i_n - 1) - l_1 l_2 ... l_{n-2} (i_{n-1} - 1) - ... - l_1 l_2 (i_3 - 1) - l_1 (i_2 - 1). \end{split}$$

После определения многомерного номера  $(i_1,i_2,...,i_n)$  моделирование случайного вектора  $\xi=(\xi_1,\xi_2,...,\xi_n)$ , имеющего закон распределения  $P(x_1,x_2,...,x_n)$ , осуществляется следующим образом:

- для дискретного распределения  $\xi = (x_{i_1}, x_{i_2}, ..., x_{i_n});$
- для кусочно-линейного распределения

$$\xi_1 = \begin{cases} (1-\varsigma_1)x_{i_1-1} + \varsigma_1x_{i_1}; \text{ если}\Big(f(x_{i_1-1}) + f(x_{i_1})\Big)\eta_1 \leq (1-\varsigma_1)f(x_{i_1-1}) + \varsigma_1f(x_{i_1}), \\ \varsigma_1x_{i_1-1} + (1-\varsigma_1)x_{i_1}; \text{ если}\Big(f(x_{i_1-1}) + f(x_{i_1})\Big)\eta_1 > (1-\varsigma_1)f(x_{i_1-1}) + \varsigma_1f(x_{i_1}), \end{cases}$$

$$\xi_n = \begin{cases} (1-\varsigma_n)x_{i_n-1} + \varsigma_n x_{i_n}; \text{ если } \Big(f(x_{i_n-1}) + f(x_{i_n})\Big)\eta_n \leq (1-\varsigma_n)f(x_{i_n-1}) + \varsigma_n f(x_{i_n}), \\ \varsigma_n x_{i_n-1} + (1-\varsigma_n)x_{i_n}; \text{ если } \Big(f(x_{i_n-1}) + f(x_{i_n})\Big)\eta_n > (1-\varsigma_n)f(x_{i_n-1}) + \varsigma_n f(x_{i_n}), \end{cases}$$

где  $\boldsymbol{\varsigma}=(\varsigma_1,\varsigma_2,...,\varsigma_n), \ \boldsymbol{\eta}=(\eta_1,\eta_2,...,\eta_n)$  — случайные векторы, равномерно распределенные на единичном n-мерном кубе. При этом предполагается, что многомерное кусочно-линейное распределение таково, что через любые точки  $f(x_{i_1-1}),\ f(x_{i_2-1}),\ ...,\ f(x_{i_n-1}),\ f(x_{i_1}),\ f(x_{i_2}),\ ...,\ f(x_{i_n})$  можно провести (n-1)-мерную плоскость;

- для кусочно-постоянного распределения

$$\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, ..., \xi_n), \quad \xi_j = x_{i_j-1} + \eta_j (x_{i_j} - x_{i_j-1}), \quad j = 1, 2, ..., n,$$

где  $\eta_j$  – равномерно распределенная на отрезке [0,1] случайная величина.

### Результаты тестовых расчетов выборки случайной величины

Пусть имеется плотность нормального распределения  $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$  с параметрами

x = [0, 10],  $\mu = 3$ ,  $\sigma = 2$ , заданная в виде таблиц кусочно-линейной функции. Длины таблиц варьировались числом интервалов по x: 100, 500, 1000, 10000, 100000. Сравнивались классический метод перебора интервалов и Alias-метод. По каждому методу в цикле моделировалась выборка из 10 млн случайных величин. В результате (табл. 5) было установлено, что применение Alias-метода заведомо выгоднее по времени выполнения, чем традиционные методы, при длине таблицы распределения больше 1000. Данный метод также успешно используется для моделирования экспериментальных источников, содержащих 1 млн частиц и более.

Таблица 5 Времена выборки (в миллисекундах) 10 млн случайных величин для классического и Alias-методов

Метод	Длина таблицы				
	100	500	1000	10000	100000
Классический	77	148	244	1954	19058
Alias-метод	64	64	65	65	74
Ускорение	1,2	2,3	3,7	30	257

#### Заключение

В статье описано использование Alias-метода для моделирования таблично заданных случайных величин. Представлен оригинальный вариант модификации исходных данных и приведения их к Alias-формату. Рассмотрены алгоритмы для моделирования многомерных таблично заданных распределений: дискретного, кусочно-линейного и кусочно-постоянного.

Alias-метод применялся автором для моделирования таблиц спектрально-углового и пространственного распределения точек рождения тормозных квантов в модели учета тормозного излучения TTBIAS [11]. В методике С-007 [2] с использованием Alias-метода моделируется угол упругого рассеяния электронов и позитронов дифференциальных сечений, заданных таблицами большой длины.

## Список литературы

- 1. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
- 2. Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П. и др. Методика С-007 решения методом Монте-Карло связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2011. Вып. 1. С. 17–24.
- 3. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло в вычислительной математике: вводный курс. С.-Пб.: Невский диалект; М.: Бином. Лаборатория знаний, 2011.
- 4. Walker A. J. New fast method for generating discrete random numbers with arbitrary frequency distributions // Electronic Lett. 1974. Vol. 10. P. 127–128.
- 5. Walker A. J. An efficient method for generating discrete random variables with general distributions // ACM Trans. Math. Software. 1977. Vol. 3, N 3. P. 253–256.
- 6. Brown F. B., Martin W. R., Calaham D. A. A discrete sampling method for vectorized Monte Carlo calculations // Trans. Am. Nucl. Soc. 1981. Vol. 38. P. 354–355.
- 7. Wilderman S. J. Vectorized algorithms for Monte Carlo simulation of kilovolt electron and proton transport: Ph. D. thesis. The University of Michigan, 1990.
- 8. Rathkopf J. F., Smidt R. K., Edwards A. L. The Alias Method: A Fast, Efficient Monte Carlo Sampling Technique. Report UCRL-JC-105535. Lawrence Livermore National Laboratory, 1990.
- 9. Edwards A. L., Rathkopf J. F., Smidt R. K. Extending the Alias Monte Carlo Sampling Method to General Distributions. Report UCRL-JC-104791. Lawrence Livermore National Laboratory, 1991.
- 10. Андросенко П. А., Попов Г. В. Эффективный метод моделирования распределения Клейна Нишины Тамма // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 1981. Т. 21, № 4. С. 1056.
- 11. Donskoy E. N., Zalyalov A. N. Bremsstrahlung account in photon transport // Parallel computational fluid dynamics. advanced numerical methods, software and applications / Eds. Chetverushkin B., Ecer A., Periaux J., Satofuka N., Fox P. Elsevier Science, 2004. P. 349–355.

# The Alias Method for Simulating Distribution Tables of Random Variables

# A. N. Zalyalov

The paper considers the Alias method of simulating distribution tables of random variables. The original algorithm of preprocessing tables is described. Formulas are given for simulation of multidimensional tabular distributions: discrete, piecewise linear and piecewise constant (specified either by histogram or as a fraction of particles within each range of values) distributions.

УДК 519.6

DOI: 10.53403/97859515049372020 25.1 88 107

# Автоматический генератор неструктурированных многогранных сеток в препроцессоре пакета программ ЛОГОС

Приводится описание автоматического генератора неструктурированных сеток, используемых при решении задач аэрогидромеханики в рамках пакета программ ЛОГОС. Рассматриваются этапы генерации объемной сетки, поэтапное построение сетки продемонстрировано на примере.

Д. Н. Смолкина, О. Н. Борисенко, М. В. Черенкова, А. Г. Гиниятуллина, М. В. Кузьменко, Н. В. Чухманов, Е. В. Потехина, Н. В. Попова, М. Р. Турусов

### Введение

В связи с возрастающей ролью численного моделирования физических процессов все больше внимания уделяется упрощению процесса подготовки задач к расчету, наиболее сложным и ресурсоемким этапом которой является генерация сеток.

В настоящее время все более востребованы сетки, состоящие в основном из шестигранных ячеек. Существует два основных подхода к их генерации: построение на основе поверхностной четырехугольной сетки [1, 2] и построение, при котором такая сетка не требуется [3–6].

В методах [5, 6] построение начинается с заполнения области сеткой из шестигранников и удаления из нее ячеек, которые находятся вне области и которые располагаются вблизи границы. Затем граница полученной сетки из шестигранников отображается на поверхность. Таким образом, получается сетка на границе области. Данные методы относительно просты и отказоустойчивы. Однако, применяя их на практике, достаточно трудно описать топологически сложные области исходной модели (с высокой кривизной, острыми кромками).

В данной статье представлен метод автоматической генерации неструктурированных сеток с многогранными элементами на основе дробной сетки [7]. В первую очередь генератор ориентирован на построение сеток для решения задач аэрогидромеханики в рамках программного пакета ЛОГОС [8, 9].

Среди зарубежных аналогов, использующих похожий подход к построению сеток, можно выделить программные комплексы Star-CCM+ [10], GAMBIT [11], OpenFOAM [12].

### Структура и этапы построения сетки

Ячейки объемной сетки, используемой для численного моделирования процессов аэрогидромеханики [13], подразделяются преимущественно на две категории: те, которые находятся вблизи моделируемого объекта, и те, которые заполняют остальной объем.

Неоднородная структура сетки является особенностью данного генератора. Вдали от границ модели ячейки сетки (*дробные*) имеют форму куба, но могут состоять и более чем из шести граней. Вблизи границы модели формируются ячейки в виде многогранных призм. Ячейки на стыке дробных ячеек и призм являются многогранниками произвольной формы. Далее эти ячейки будут называться *отсечеными*, а процесс их построения — *отсечением*. На рис. 1 приведен плоский срез сетки с обозначениями ячеек.

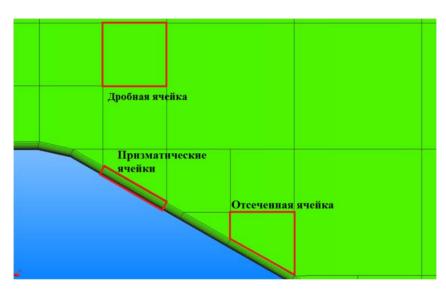


Рис. 1. Плоский срез сетки

Исходными данными для генератора является поверхностная сетка, состоящая из треугольных ячеек (для краткости будем называть их просто треугольниками). Она аппроксимирует поверхность геометрической модели с учетом кривизны поверхностей и характерных кривых. Характерные кривые — это ломаные, проходящие по особенностям геометрической модели (негладкие места стыковки поверхностей, острые ребра геометрии).

Перед началом работы генератора поверхностная сетка проверяется на наличие в ней открытых контуров и пересечений. В случае их обнаружения построение объемной сетки не выполняется.

Процесс генерации объемной неструктурированной сетки состоит из следующих этапов:

- определение/получение характерных кривых (особенностей) модели;
- построение поверхностной сетки из треугольников, смещенной относительно исходной;
- построение дробной сетки;
- отсечение дробных ячеек треугольниками смещенной поверхностной сетки;
- улучшение качества отсеченных ячеек;

- построение призматических ячеек;
- анализ качества ячеек.

Рассмотрим подробно каждый из этих этапов.

## Определение характерных особенностей модели

Для описания острых кромок и/или деталей поверхности, которые необходимо сохранить при построении объемной сетки, в генераторе реализован алгоритм определения характерных кривых модели. Некоторые подходы к выявлению характерных особенностей поверхностной сетки описаны в [14-16].

В настоящее время в генераторе при построении сетки учитываются три типа характерных кривых: характерные кривые модели, сформированные в графическом интерфейсе (до запуска генератора), границы выделенных областей, а также автоматически определенные характерные особенности геометрии. Далее будет рассмотрен алгоритм автоматического определения характерных особенностей модели, основанный на методе, предложенном в [14].

Основным параметром для выявления участков характерных кривых является угол между нормалями к плоскостям треугольников поверхностной сетки, имеющих общее ребро. Если этот угол превышает заданное значение (по умолчанию оно составляет  $44^{\circ}$ ), то считается, что общее ребро треугольников является участком характерной кривой (рис. 2,a).

Еще одним параметром для определения характерных кривых является  $\partial e \phi u u u m$  угла в узлах сетки на поверхности модели. Дефицит угла d узла  $\upsilon$  вычисляется как  $d(\upsilon) = 2\pi - \sum \alpha_i$ ,

где  $\alpha_i(e_i,e_{i+1})$  – угол между соседними ребрами треугольников, сходящихся в узле  $\upsilon$  (рис.  $2,\delta$ ). Дефицит угла близок по смыслу к гауссовой кривизне, а его значение показывает отличие поверхности в рассматриваемой точке от плоскости. Если рассчитанный для узла сетки дефицит угла превышает заданное предельное значение (по умолчанию  $72^\circ$ ), то такой узел считается особенностью и будет учитываться при определении характерных кривых.

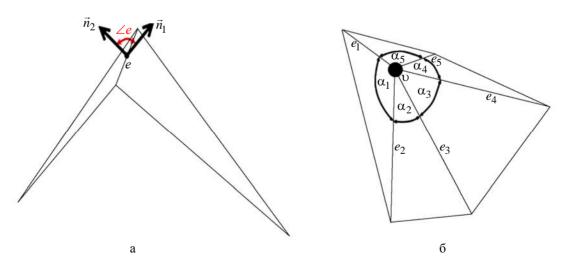


Рис. 2. Иллюстрация параметров для определения характерных кривых: а – угол между нормалями к плоскостям треугольников; б – углы между ребрами треугольников для вычисления дефицита угла узла о

На основании вышеуказанных критериев выполняется формирование списков участков характерных кривых (ребер) и узлов, для которых выполнено условие дефицита угла. Сформированный список ребер (список 1) будет использоваться для построения характерных кривых, а список узлов (список 2) — для проверки выполнения одного из приведенных ниже критериев фильтрации.

Алгоритм формирования характерной кривой заключается в последовательном добавлении в кривую ребер из списка 1, пока не будет выполнено одно из условий:

- узел, который является концом характерной кривой, имеет дефицит угла, т. е. принадлежит списку 2:
  - кривая замкнулась;
  - нет следующего ребра, выходящего из узла.

Результат выполнения алгоритма — набор характерных кривых, образованных ребрами треугольников поверхностной сетки. Среди этих кривых могут быть так называемые *пожные*, которые удовлетворяют совокупности следующих критериев фильтрации:

- кривая состоит из небольшого количества ребер;
- кривая не содержит узлов с дефицитом угла;
- кривая не является замкнутой.

Ложные кривые удаляются.

На рис. 3 жирными линиями показаны ложные кривые, подлежащие удалению.

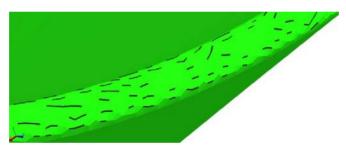


Рис. 3. Удаляемые ложные кривые

Результат работы алгоритма определения характерных кривых представлен на примере крыла самолета DLRF6 (рис. 4).

В дальнейшем будем различать два типа узлов, принадлежащих характерной кривой: обычные и особые. Особый узел — это узел, в котором сходятся две или более характерных кривых. По умолчанию речь идет об обычном узле.

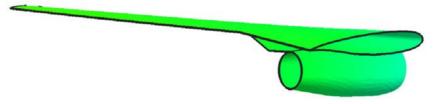


Рис. 4. Крыло самолета DLRF6 с выявленными характерными кривыми (выделены жирными линиями)

## Построение смещенной поверхности

После определения характерных кривых выполняется построение поверхностной сетки из треугольников, смещенной относительно исходной, – так называемой *смещенной поверхности*. Методы построения смещенной поверхности, учитывающие характерные особенности модели, при генерации объемных сеток с призматическими ячейками представлены в работах [17, 18]. Построение смещенной поверхности в данной работе основывается на геометрическом методе и состоит из двух основных этапов:

- 1) определение оптимального направления сдвига в каждом узле сетки;
- 2) определение максимально возможного, не превышающего заданного, смещения\* вдоль направления сдвига.

Набор треугольников с нулевым смещением будем называть неподвижной границей, набор с ненулевым смещением – подвижной границей (рис. 5).

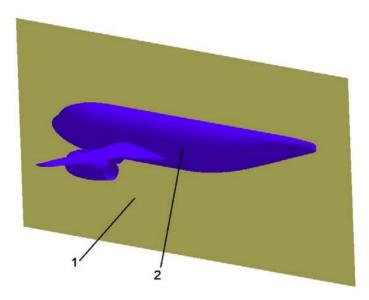


Рис. 5. Неподвижная (1) и подвижная (2) границы

Направление сдвига для узла на гладкой поверхности подвижной границы определяется по формуле

$$\vec{n}_i = \frac{\sum\limits_{j}^{N_i} \vec{n}_{ij} \alpha_{ij} d_{ij}}{\left[\sum\limits_{j}^{N_i} \vec{n}_{ij} \alpha_{ij} d_{ij}\right]},$$

где  $N_i$  — количество треугольников, примыкающих к i-му узлу;  $\alpha_{ij}$  — угол в j-м треугольнике при i-м узле,  $d_{ij}$  — заданное смещение j-го треугольника,  $\vec{n}_{ij}$  — нормаль плоскости j-го треугольника.

<sup>\*</sup>Под смещением узла или треугольника здесь и далее подразумевается скалярная величина – расстояние между смещенным и исходным положением этого узла или треугольника.

Если узел принадлежит ребру характерной кривой, то формируется двугранный угол между «средними плоскостями» треугольников, примыкающих к этому ребру с двух сторон. Сдвиг рассматриваемого узла направлен вдоль биссекторной плоскости двугранного угла и определяется по формуле

$$\vec{n}_i = \frac{\frac{\vec{n}_1 + \vec{n}_2}{1 + \vec{n}_1 \vec{n}_2}}{\left[\frac{\vec{n}_1 + \vec{n}_2}{1 + \vec{n}_1 \vec{n}_2}\right]},$$

где  $\vec{n}_1, \ \vec{n}_2$  — нормали к плоскостям двугранного угла.

Если узел принадлежит треугольникам как подвижной, так и неподвижной границы, то он объявляется граничным. Направление сдвига граничного узла корректируется по формуле

$$\vec{n}_{i \text{ bord}} = \vec{n}_i - \vec{n}_0 (\vec{n}_i \vec{n}_0),$$

где в скобках – скалярное произведение векторов,  $\vec{n}_i$  – направление сдвига вдоль биссекторной плоскости,  $\vec{n}_0$  – средняя нормаль к плоскостям треугольников неподвижной границы.

Если узел является особым узлом характерной кривой, то для него строится многогранный угол, ребра которого являются ребрами характерных кривых, сходящихся в рассматриваемом узле. В многогранный угол вписывается шар единичного радиуса таким образом, чтобы он оказался как можно ближе к узлу. Сдвиг особого узла направлен вдоль линии, соединяющей узел и центр шара. Задача оптимального расположения шара в многогранном угле сводится к канонической задаче квадратичного программирования.

После вычисления направлений сдвига проводится их коррекция, которая осуществляется итерационно методом подвижного фронта, начиная от узла характерных кривых, далее вдоль ребер, а затем вглубь гладких поверхностей.

Чтобы избежать нежелательных деформаций геометрической модели, коррекции подвергаются только направления сдвига в узлах гладких поверхностей. При их коррекции используется метод Гаусса — Зейделя: направление сдвига узла находится как нормализованная сумма направлений сдвигов соседних узлов, взятых с соответствующими коэффициентами [19]:

$$\vec{n}_{i}' = \vec{n}_{i} \left( 1 - \alpha \right) + \frac{\sum_{j}^{N_{i}} \vec{n}_{ij} \omega_{ij}}{\sum_{j}^{N_{i}} \omega_{ij}} \alpha. \tag{1}$$

Для достижения достаточной гладкости поверхности оптимальным считается выбор весового коэффициента  $\alpha = 0,3$ . При коррекции нормали в *i*-м узле весовой коэффициент  $\omega_{ij}$  для *j*-го узла, соединенного ребром с *i*-м, рассчитывается по формуле

$$\omega_{ij} = \frac{\operatorname{tg} \frac{\alpha_{j+1}}{2} + \operatorname{tg} \frac{\alpha_{j}}{2}}{l_{ii}},\tag{2}$$

где  $l_{ij}$  — длина ребра, соединяющего i-й и j-й узлы;  $\alpha_{j+1}$  и  $\alpha_j$  — углы при узле j, примыкающие к этому ребру.

В особых узлах характерных кривых направления сдвигов не корректируются.

Если узел принадлежит ребру характерной кривой, то при коррекции рассматриваются только два соседних узла, также лежащие на этой кривой:

$$\vec{n}_i' = \vec{n}_1 \frac{l_2}{l_1 + l_2} + \vec{n}_2 \frac{l_1}{l_1 + l_2},\tag{3}$$

где  $\vec{n}_1$  и  $\vec{n}_2$  – нормали в узлах, соседних для i-го на характерной кривой;  $l_1$  и  $l_2$  – длины ребер характерной кривой, соединяющих эти узлы с узлом i.

На следующем шаге итерационно определяются узлы с некорректными направлениями сдвига, заданные смещения вдоль которых приводят к развороту нормалей к плоскостям треугольников на 90°. Для каждого такого узла (он находится в невыпуклой области модели) выделяется окрестность радиусом, не превышающим смещения данного узла. Некорректное направление сдвига узла изменяется путем осреднения с направлениями сдвига узлов в выделенной окрестности.

На втором этапе определяются смещения вдоль рассчитанных направлений сдвига. Смещение i-го узла рассчитывается по формуле

$$d_i = \min\left\{\frac{d_{ij}}{\vec{n}_{ij}\vec{l}_i}\right\},\tag{4}$$

где  $\vec{l}_i$  — направление сдвига i-го узла;  $d_{ij}$  — заданное смещение примыкающего к i-му узлу треугольника,  $\vec{n}_{ii}$  — нормаль к плоскости j-го треугольника.

Для каждого j-го треугольника исходной поверхностной сетки рассчитывается допустимое смещение  $\tilde{d}_{ij}$ , при котором треугольник может повернуться не более чем на 90° по отношению к исходному положению. Исходя из этого значения корректируются смещения в узлах треугольников по формуле

$$d_i' = \min \left\{ d_i, 0.9 \frac{\tilde{d}_{ij}}{\vec{n}_{ij} \vec{l}_i} \right\},\tag{5}$$

где  $d_i'$ ,  $d_i$  — новое и исходное смещения i-го узла j-го треугольника;  $\vec{l}_i$  — направление сдвига i-го узла;  $\tilde{d}_{ij}$  — допустимое смещение j-го треугольника,  $\vec{n}_{ij}$  — нормаль к плоскости j-го треугольника.

Практика показала, что использование формулы (5) для расчета смещения узлов, расположенных в острых углах исходной модели, приводит к снижению качества смещенной поверхности: не сохраняется форма исходной поверхности, на характерных кривых появляются узкие вытянутые треугольники. Поэтому в узлах характерной кривой, лежащих на общем ребре треугольников, двугранный угол между которыми не превышает 30°, смещение устанавливается равным 1/3 от заданного значения (рис. 6).

Исходя из рассчитанных смещений и направлений сдвига вычисляются положения узлов смещенной поверхности.

Далее проверяется сохранение формы исходной поверхности. С этой целью для каждого треугольника вычисляется допустимый угол между нормалями к его плоскостям в исходном и смещенном положениях. Этот угол плавно меняется от  $17^{\circ}$  в областях, близких к характерным особенностям модели, до  $60^{\circ}$  в областях, удаленных от характерных кривых. Если угол превышает допустимое значение, то считается, что для смещенной поверхности рассматриваемого треугольника с номером j требуется приближение к исходному положению, т. е. уменьшение смещения.

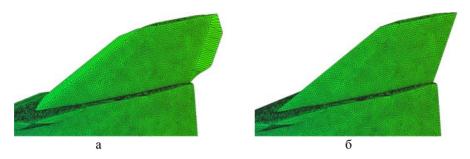


Рис. 6. Фрагмент смещенной поверхности: a-c расчетом сдвига по формуле (4), 6-c0 скорректированным смещением

Для этого j-го треугольника находится узел с наименьшим смещением  $d_{\min}$ . Для двух других узлов треугольника смещения корректируется по формуле

$$d_i' = \min \left\{ d_i, \frac{1}{2} \left( d_i + \frac{d_{\min}}{\vec{n}_{ij}\vec{l}_i} \right) \right\},\,$$

где  $\vec{l_i}$  — направление сдвига i-го узла;  $d_i'$ ,  $d_i$  — новое и исходное смещения i-го узла j-го треугольника;  $\vec{n}_{ij}$  — нормаль к плоскости j-го треугольника.

Если хотя бы для одного треугольника проводилась коррекция смещения, то она выполняется и для всей поверхности методом подвижного фронта при продвижении от характерных кривых вглубь области. При этом используется метод Гаусса — Зейделя с весовыми коэффициентами, аналогичными приведенным в формулах (1)–(3) для коррекции направлений сдвига. Новое смещение i-го узла вычисляется по формуле

$$d_i' = \min \left\{ d_i, d_i \left( 1 - d_{\max_i} \right) + d_{i_{-} \text{smooth}} d_{\max_i} \right\},$$

где  $d_{i\_\mathrm{smooth}}$  — усредненное в результате коррекции смещение,  $d_{\mathrm{max}_i}$  — максимальная относительная разница смещения i-го узла до и после коррекции.

В процессе построения могут возникнуть пересечения исходной и смещенной поверхностей или самопересечения. В этом случае также выполняется приближение смещенной поверхности к исходной. Уменьшение смещения осуществляется не для всей смещенной поверхности, а только для узлов треугольников, которые были детектированы как пересекающиеся. При этом смещение сокращается в  $N_{\rm decr}$  раз:

$$N_{\text{decr}} = 0,7 - 0,001N_{\text{iter}},$$

где  $N_{\mathrm{iter}}$  – номер текущей итерации

Формирование и коррекция формы смещенной поверхности, проверка на самопересечение и пересечение и при необходимости приближения смещенной поверхности к исходной осуществляются итерационно до тех пор, пока не перестанут детектироваться пересечения.

# Построение дробной сетки

Следующим этапом генерации является построение дробной сетки [20]. Параметрами для построения являются максимальный размер ячейки и размер дробной ячейки у поверхности.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Дополнительные условия определяются размерами дробных ячеек для контрольных областей. Размер любой ячейки дробной сетки, попавшей в контрольную область полностью или частично, не может быть больше, чем заданный для этой области. В настоящее время могут быть контрольные области следующих типов: прямоугольный параллелепипед, сфера, конус, цилиндр, а также их тонкостенные варианты (рис. 7, 8).



Рис. 7. Примеры контрольных областей (объекты с прозрачностью)

Алгоритм построения дробной сетки можно разделить на несколько этапов. На первом этапе на основе габаритов поверхностной сетки выполняется построение объемных ячеек максимального размера. После этого проводится распределение треугольников поверхностной сетки по ячей-кам объемной сетки. Все объемные ячейки, в которые попал хотя бы один треугольник, должны быть отмечены, поскольку они будут использоваться на этапе отсечения треугольниками поверхностной сетки ячеек дробной сетки. Чтобы выявить ячейки, не принадлежащие области моделирования, для остальных ячеек определяются их положения относительно поверхностной сетки.

Задача определения положения объемной ячейки относительно треугольной сетки решается с использованием следующего алгоритма. Из центра ячейки параллельно одной из осей координат выпускается луч до пересечения с треугольниками. Если такой треугольник найден, анализируется косинус угла между нормалью к плоскости треугольника и лучом. Если косинус меньше 0, то это означает, что ячейка находится внутри модели, ограниченной поверхностной сеткой, если больше 0 – снаружи. Если нормаль к плоскости треугольника ортогональна лучу либо точка пересечения луча и треугольника совпадает с узлом или попадает на ребро треугольника, то такой случай считается особым и не рассматривается. При этом изменяется направление, по которому строится луч (выбирается другая ось координат), после чего процедура поиска пересечения луча и треугольников повторяется.

На следующем этапе итерационно проводится дробление ячеек, содержащих треугольники. Цель разбиения – добиться требуемого размера дробной ячейки вблизи поверхности, который вычисляется по формуле

$$S_{ad} = \frac{S_{reg}}{2^L}, \qquad L = \left\lceil \log_2 \frac{S_{reg}}{\left(\sum_{i=1}^n w_i\right) / n} \right\rceil, \tag{6}$$

где L – требуемый уровень дробления ячейки ( $\leq 20$ ),  $S_{\rm reg}$  – размер (длина ребра) ячейки,  $w_i = \sqrt{S_i}$  – «вес» i-го треугольника, n – число треугольников в дробной ячейке; запись [ ] означает целую часть числа.

В каждой итерации дробления участвуют только те ячейки и подъячейки, в которые попали треугольники. Проводится перераспределение треугольников по восьми новым подъячейкам. Так как в общем случае количество треугольников, попавших в ячейку, изменилось, вычисляется тре-

буемый уровень разбиения по второй формуле (6). Если текущий уровень дробления ячейки меньше требуемого, то выполняется следующая итерация.

После завершения дробления ячейки определяются положения ее дробных подъячеек, не содержащих треугольники, относительно треугольной сетки и выполняется обработка контрольных областей (все дробные ячейки, принадлежащие области, дополнительно дробятся до заданного для области размера).

Заключительным шагом построения дробной сетки является балансировка объемов соседних ячеек: они должны отличаться не более чем в 8 раз; ребра соседних ячеек должны отличаться не более чем в 2 раза. Анализ ячеек начинается от треугольников поверхности, далее делается проход по соседним ячейкам внутрь сетки. Если объем ячейки не удовлетворяет указанным выше условиям, проводится дополнительное ее дробление.

На рис. 8 приведены примеры построенных сеток с использованием контрольных областей в виде тонкостенных фигур (для наглядности представлены сечения плоскостями).

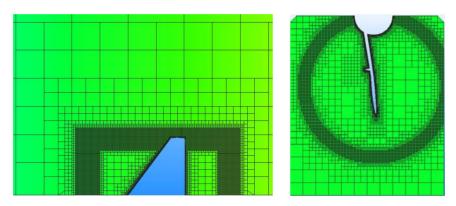


Рис. 8. Примеры сеток с контрольными областями в виде тонкостенных фигур

# Отсечение дробных ячеек треугольниками поверхностной сетки

Начальными данными для этого этапа [21-26] являются: поверхностная сетка S из треугольников, дробная сетка C, а также данные, приписанные каждой ячейке сетки C, — набор треугольников и описание характерных кривых. Результатом будет многогранная сетка P, полученная в результате отсечения дробной сетки треугольниками исходной поверхностной сетки.

Для построения сетки P проводятся следующие операции:

- $\bullet$  определение положения узлов сетки C относительно сетки S (внутри, снаружи или на поверхности модели). Краткий обзор применяемых методов можно найти в [27];
  - нахождение пересечений ребер дробной сетки с треугольниками поверхностной сетки;
- ullet выполнение операции объединения найденных точек пересечения друг с другом, если расстояние между точками мало (<10<sup>-6</sup> м);
- $\bullet$  построение внутренних граней многогранной сетки P на основе графовых алгоритмов, подробно описанных в [28];
  - $\bullet$  построение внешних граней многогранной сетки P.

Построенная сетка P обладает следующими свойствами: каждое ребро в ячейке разделяет только две грани; грани ячейки могут быть как выпуклыми, так и невыпуклыми; ячейки могут быть как выпуклыми, так и невыпуклыми.

В областях поверхностной сетки, не содержащих характерных кривых, будут построены многогранниками простой формы (рис. 9). В областях, содержащих характерные кривые, напротив, могут быть построены многогранные ячейки достаточно сложной формы (рис. 10).

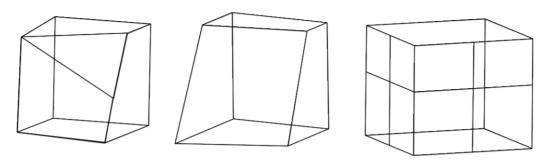
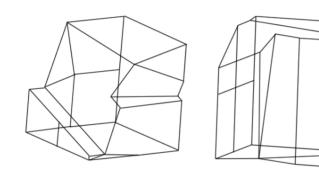


Рис. 9. Примеры многогранных ячеек простой формы



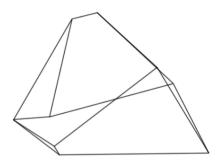


Рис. 10. Примеры невыпуклых ячеек

Особенностью применяемого подхода к отсечению дробных ячеек является явный поиск пересечений дробной сетки и треугольников смещенной поверхности, что позволяет более подробно описать все характерные особенности исходной модели (углы, щели и т. п.) в отличие от широко известного алгоритма марширующих кубов [29]. Однако следует отметить, что именно этот факт значительно повышает вычислительную сложность алгоритма.

# Улучшение качества отсеченных ячеек

После этапа отсечения ячеек проводится улучшение качества ячеек сетки [30]: разрезание невыпуклых ячеек, слияние ячеек малого объема с соседними ячейками, объединение поверхностных граней ячейки, разрезание невыпуклых граней.

**Разрезание невыпуклых ячеек.** В процессе отсечения могут быть сформированы невыпуклые ячейки, способные в дальнейшем негативно повлиять на численное моделирование. Для решения данной проблемы реализован алгоритм их разрезания. Алгоритм разработан с учетом условий минимизации добавления новых узлов в сетку и оптимизации распределения объемов между новыми ячейками.

Разрезание проводится по биссектрисе угла между двумя поверхностными (аппроксимирующими смещенную поверхность) гранями, образующими ребро невыпуклости, или по плоскостям

этих граней. В качестве оптимальной плоскости разрезания выбирается плоскость с наибольшим значением коэффициента качества потенциальных ячеек, определяемого по формуле

$$K = 1 - \frac{N_{\text{п.y}}}{N_{\text{p.r}}} + \frac{S_1}{S_2},$$

где  $N_{\rm п.y}$  — количество «притянутых» узлов ячейки, т. е. не лежащих в плоскости разреза, но близких к ней;  $N_{\rm p.r}$  — количество разрезанных граней исходной ячейки;  $S_1$ ,  $S_2$  — площади неразрезанных граней, лежащих по разные стороны от плоскости разреза.

На рис. 11 на примере показано выполнение алгоритма разрезания невыпуклых ячеек. На первом этапе проводится разрезание по ребру невыпуклости JQ, после которого остаются многогранники PJQION (выпуклый) и ABCRDEFMGHIQJL (невыпуклый). На втором этапе происходит разрезание по ребру невыпуклости DJ. Исходя из условий оптимального соотношения объемов плоскость разреза проходит по плоскости грани DRQJ. В итоге образуется выпуклый многогранник SBCRDTHIQJ и невыпуклый ASDEFGTJLM, при этом добавлены новые узлы S и T. На последнем этапе выполняется разрезание по ребру невыпуклости EL. Плоскость разреза проходит по плоскости грани ELMF.

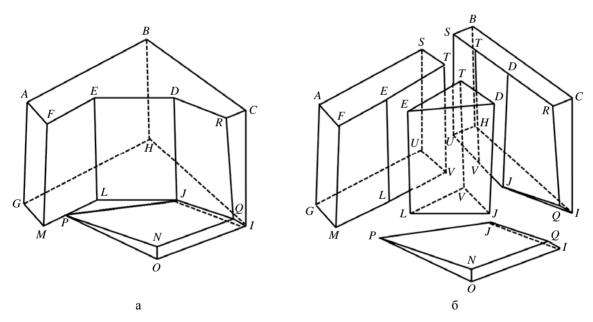


Рис. 11. Пример выполнения алгоритма разрезания невыпуклых ячеек: а – исходная ячейка; б – совокупность ячеек после разрезания

Слияние ячеек малого объема с соседними ячейками. Для поддержания равномерности объемов отсеченных ячеек разработана операция объединения ячеек, имеющих малый объем по сравнению с соседними ячейками. На рис. 12 приведен один из возможных вариантов расположения ячеек сетки, когда такая операция необходима.

Пусть дана многогранная отсеченная ячейка малого объема и известны ее соседние ячейки. Нужно из множества всех соседних ячеек выбрать такую, чтобы в результате объединения была образована выпуклая ячейка и разница объемов между ячейками на данном участке сетки была минимальной.

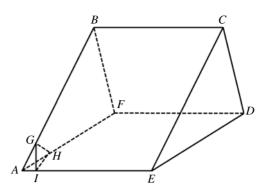


Рис. 12. Пример необходимости слияния ячейки малого объема (*AGIH*) с соседней ячейкой (*GBCEIHFD*)

Для определения наиболее подходящего варианта объединения из всех соседей выбирается ячейка, имеющая большую площадь грани, общую с малой ячейкой, больший объем и меньшее число поверхностных граней.

Объединение поверхностных граней ячейки. Поскольку на основе поверхностных граней отсеченных ячеек формируются призматические ячейки, необходимо исключить значительную разницу между площадями соседних граней. Одним из способов решения данной проблемы в рамках одной отсеченной ячейки является операция объединения граней.

На рис. 13,a показана исходная ячейка, а на рис. 13,6 — ячейка с объединенными поверхностными гранями. В результате выполнения алгоритма поверхностные грани ABEF и BCDE объединены в грань ABCDEF.

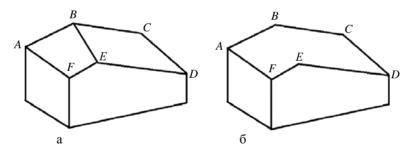


Рис. 13. Пример выполнения алгоритма объединения поверхностных граней: а – исходная ячейка; б – отсеченная ячейка с объединенными поверхностными гранями

Сначала в ячейке проводится поиск поверхностных граней с сильно различающимися площадями. Если такие грани присутствуют в ячейке и ребро, их разделяющее, не принадлежит характерной кривой, то эти грани будут объединяться. Далее все грани ячейки сортируются в зависимости от их площади и определяются все варианты их объединения (сочетания без повторений). После этого выбирается наиболее благоприятный вариант из всех возможных. Требования, предъявляемые к наилучшему варианту объединения, — выпуклость, минимальная разница периметров полученных граней.

**Разрезание невыпуклых граней.** Одним из условий получения призматической ячейки приемлемого качества является ее формирование исходя из выпуклой грани отсеченной ячейки. С этой целью добавлена возможность разрезания невыпуклых граней. В генераторе реализованы три алгоритма разрезания грани в зависимости от количества и расположения на грани узлов невыпуклости. На рис. 14 представлены примеры ячеек для каждого типа разрезания с выделенными узлами невыпуклости.

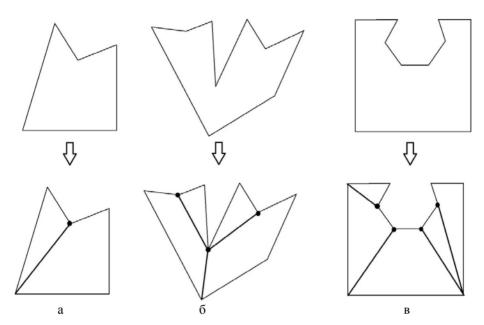


Рис. 14. Пример разрезания невыпуклых граней: а – одноточечное разрезание; б – многоточечное разрезание; в – разрезание по секторам; сверху – грани до разрезания, снизу – грани после разрезания

Одноточечное разрезание грани (см. рис. 14,*a*) выполняется в том случае, если грань имеет только один узел невыпуклости. С помощью графовых алгоритмов находятся все возможные варианты разрезания грани. Из полученных вариантов удаляются комбинации, содержащие невыпуклые и вырожденные многоугольники. Из оставшихся выбирается комбинация с минимальным соотношением периметров.

Mноготочечное разрезание грани (см. рис. 14,6) используется в случае, если грань имеет несколько непоследовательно расположенных узлов невыпуклости. Соединяя такие узлы по направлению обхода грани и против него, выбираем грань с минимальной мерой качества

$$M=N+\frac{L}{P},$$

где N — количество узлов новой грани, не лежащих на одной прямой; L — длина нового ребра отрезаемой части; P — периметр отрезаемой части.

Разрезание *по секторам* (см. рис. 14,*в*) используется, если грань имеет несколько последовательных узлов невыпуклости. Сектор разреза определяется пересечением полупространств, образованных ребрами, исходящими из узла невыпуклости.

Грань формируется по узлу невыпуклости и узлу, найденному следующим способом. Если в сектор разреза не попал ни один узел грани, то берем ближайший узел в направлении обхода. Если в сектор попал один узел, то берем его. Если в сектор разреза попало несколько узлов, то выбираем узел с минимальной мерой качества, которая определяется по формуле

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

$$M = \left| S_{\text{loc}} - \frac{S_{\text{face}}}{N_{\text{SP}} + 1} \right| \frac{1}{S_{\text{face}}} + \begin{cases} 0, \text{ если в новой грани 4 узла;} \\ 0,5, \text{ если в новой грани 3 узла;} + \begin{cases} 0, \text{ если новая грань выпуклая;} \\ 10 \text{ в любом другом случае;} \end{cases}$$

Здесь  $S_{
m loc}$  — площадь новой грани,  $S_{
m face}$  — площадь исходной грани,  $N_{
m SP}$  — количество узлов невыпуклости в исходной грани.

# Построение призматических ячеек

Внешние грани ячеек объемной сетки, построенной на этапе отсечения, образуют поверхностную сетку, которая используется для построения призматических ячеек.

Для формирования призматических ячеек вычисляются барицентрические координаты узлов поверхностных граней отсеченных ячеек в треугольниках смещенной поверхности. С использованием этих координат узлы со смещенной поверхности переносятся на исходную поверхность. Далее по заданным параметрам (коэффициент сгущения, количество слоев) строится набор ячеек.

В случае близкого расположения исходной и смещенной поверхностей осуществляется «схлопывание» ребер ячеек и изменение количества слоев. Это позволяет избежать создания малых ребер при формировании призматических ячеек.

### Анализ качества

В генераторе реализована проверка качества отсеченных и призматических ячеек [31]. Качество для каждого типа ячеек анализируется непосредственно после выполнения соответствующего этапа построения сетки (отсечения, формирования призматических ячеек) по критериям, учитывающим: наличие замкнутых ячеек и свободных ребер, объемы ячеек и соотношения объемов соседних ячеек, скошенность поверхностных граней, соотношение длин ребер, количество узлов поверхностных граней, количество невыпуклых граней, соотношение площадей поверхностных граней.

# Пример построения сеточной модели автоматическим генератором

Построение объемной многогранной сетки продемонстрировано на примере двухзвенного профиля крыла самолета. Общий вид геометрии и зона вблизи области моделирования изображены на рис. 15. На рис. 16–20 показаны этапы построения сеточной модели.

Количество ячеек составляет 3,3 млн. Время расчета сетки – 4 минуты (Intel Core i7, 2,79  $\Gamma\Gamma$ ц, 8 процессоров).

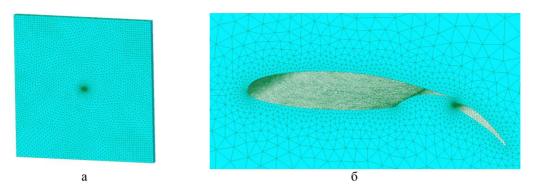


Рис. 15. Общий вид исходной поверхностной сетки для двухзвенного профиля крыла самолета (a) и зона моделирования в увеличенном масштабе (б)

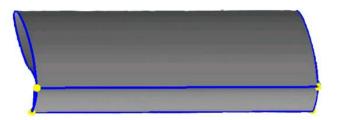


Рис. 16. Построение характерных кривых и вершин

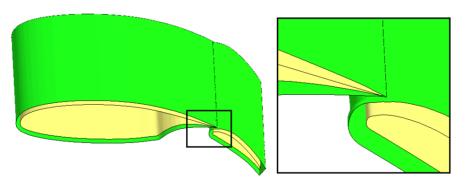


Рис. 17. Построение смещенной поверхности

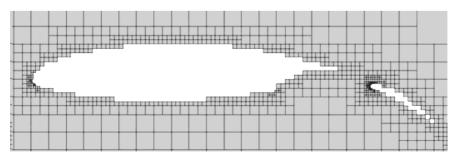


Рис. 18. Построение дробной сетки

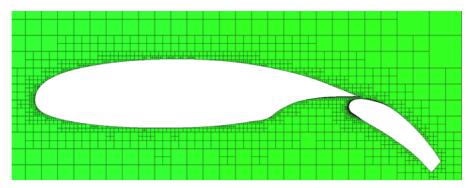


Рис. 19. Отсечение дробной сетки треугольниками поверхностной сетки

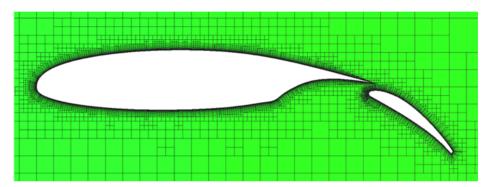


Рис. 20. Построение сетки с призматическими ячейками

### Заключение

Рассмотрены основные этапы работы генератора неструктурированных многогранных сеток, реализованного в препроцессоре программного комплекса ЛОГОС. Приведены результаты построения сеточной модели для двухзвенного профиля крыла самолета.

# Список литературы

- 1. Blacker T. D., Meyers R. J. Seams and wedges in plastering: a 3D hexahedral mesh generation algorithm // Engineering with computers. 1993. Vol. 9(2). P. 83–93.
- 2. Tautges T. J., Timothy J., Mitchell S. A. Progress report on the whisker weaving all-hexahedral meshing algorithm // Proc. of the  $5^{th}$  Int. conf. on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation. Mississippi State University, 1996. P. 659-670.
- 3. Li T. S., Armstrong C. G., McKeag R. M. Automatic partitioning of analysis models using the medial axis transform // Advances in Parallel and Vector Processing for Structural Mechanics. Edinburgh, UK: Civil-Comp Press, 1994. P. 165–171.

- 4. Sheffer A., Etzion M., Rappoport A., Bercovier M. Hexahedral mesh generation using the embedded Voronoi graph // Proc. of the 7<sup>th</sup> Int. Meshing Roundtable. Dearborn, Michigan, USA, 1998. P. 347–364.
- 5. Schneider R. A grid-based algorithm for the generation of hexahedral element meshes # Engineering with computer. 1996. Vol. 12, N 3–4. P. 168–177.
- 6. Weiler F., Shindler R. Automatic geometry-adaptive generation of quadrilateral and hexahedral element meshes for the FEM // Proc. of the 5<sup>th</sup> Int. conf. on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation. Mississippi State University, 1996. P. 689–697.
- 7. Фархутдинов В. Ф., Тарасов В. И., Соловьев А. Н. и др. Обзор возможностей по обработке геометрических и построению сеточных моделей в ЛОГОС-Препост // Тр. XIV Международ. конф. «Супервычисления и математическое моделирование». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013. С. 585–592.
- 8. Погосян М. А., Савельевских Е. П., Шагалиев Р. М. и др. Применение отечественных суперкомпьютерных технологий для создания перспективных образцов авиационной техники // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2013. Вып. 2. С. 3–17.
- 9. Сафронов А. В., Дерюгин Ю. Н., Жучков Р. Н. и др. Результаты валидации многофункционального пакета программ ЛОГОС при решении задач аэрогазодинамики старта и полета ракет-носителей // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, № 9. С. 83—95.
- 10. STAR-CCM+ Siemens PLM Software [Electronic resource]. https://mdx.plm.automation.siemens.com/star-ccm-plus.
- 11. Jiangtao Hu, Lee Y. K., Blacker T., Jin Zhu. Overlay grid based geometry cleanup // Proc. of the 11<sup>th</sup> Int. Meshing Roundtable. Ithaca, New York, USA, 2002. P. 313–324.
- 12. Karlsson J. Implementing anisotropic adaptive mesh refinement in OpenFOAM // Master's Thesis in Computer Science, Algorithms, Languages and Logic. Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden, 2012.
- 13. Козелков А. С., Жучков Р. Н., Уткина А. А., Володченкова К. Б. Моделирование турбулентных течений на сетках гибридной структуры с использованием схем высокого порядка точности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2014. Вып. 3. С. 18–31.
- 14. Jiao X., Heath M. T. Feature detection for surface meshes // Proc. of the 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations. Honolulu, Hawaii, USA, 2002. P. 705–714.
- 15. Baker T. Identification and preservation of surface features // Proc. of the 13<sup>th</sup> Int. Meshing Roundtable. Williamsburg, Virginia, USA, 2004. P. 299–310.
- 16. Jiao X., Alexander P. Parallel feature-preserving mesh smoothing // Proc. of the Int. conf. on Computational Science and Applications. Singapore, 2005. P. 1180–1189.
- 17. Tomac M., Eller D. Towards automated hybrid-prismatic mesh generation // Procedia Engineering. 2014. Vol. 82. P. 377 389.
- 18. Kallinderis Y., Ward S. Prismatic grid generation for three-dimensional complex geometries // AIAA Journal. 1993. Vol. 31, N 10. P. 1850–1856.
- 19. Floater M. S. Mean value coordinates // Computer Aided Geometric Desine. 2003. Vol. 20(1). P. 19–27.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

- 20. Fujimoto K., Kozo Fujii, Wang Z. J. Improvements in the reliability and efficiency of body-fitted cartesian grid method // 47<sup>th</sup> AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition. Orlando, Florida, USA, 2009.
- 21. Aftosmis M. J. Solution adaptive cartesian grid methods for aerodynamic flows with complex geometries // Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series. Rhode-Saint-Genese, Belgium, 1997.
- 22. Berger M. J., Aftosmis M. J. Aspects (and aspect ratios) of cartesian mesh methods // Proc. of the 16<sup>th</sup> Int. conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics, to Appear in «Lecture Notes in Physics» Berlin: Springer, 1998. Vol. 515. P. 1–12.
- 23. Liang Q., Zang J., Borthwick A. G. L., Taylor P. H. Shallow flow simulation on dynamically adaptive cut-cell quadtree // Int. J. for Numerical Methods in Fluids. 2007. Vol. 53(12). P. 1777–1799.
- 24. Kovalev K. Unstructured hexahedral non-conformal mesh generation: Ph. D. Dissertation. University of Brussel, 2005.
- 25. Oaks W., Paoletti S. Polyhedral mesh generation // Proc. of the 9<sup>th</sup> Int. Meshing Roundtable. New Orleans, LA, USA, 2000. P. 57–67.
- 26. Zavattieri P. Optimization strategies in unstructured mesh generation // Int. J. for Numerical Methods in Engineering. 1996. Vol. 39. P. 2055.
- 27. Handbook of Grid Generation / Eds. J. F. Thompson, B. K. Soni, N. P. Weatherill. Boca Raton, Florida, USA: CRC PRESS, 1999. Chap. 21. P. 7–18.
- 28. Kruse R. L., Bruce P., Tondo C. L. Data structure and program design in C. Upper Saddle River, New Jersey, USA: Prentice-Hall, 1991.
- 29. Lorensen W. E., Cline H. E. Marching cubes: a high resolution 3D surface reconstruction algorithm // ACM Computer Graphics. 1987. Vol. 21(4). P. 163–169.
- 30. Jasak H., Tukovi Z. Automatic mesh motion for the unstructured finite volume method // Transactions of FAMENA. 2006. Vol. 30(2). P. 1–20.
- 31. Голованов Н. Н. Геометрическое моделирование. М.: Физматлит, 2002. С. 391.

# An Automatic Generator of Unstructured Polyhedral Grids in the LOGOS Software Preprocessor

D. N. Smolkina, O. N. Borisenko, M. V. Cherenkova, A. G. Giniyatullina, M. V. Kuz'menko, N. V. Chukhmanov, E. V. Potekhina, N. V. Popova, M. R. Turusov

The paper describes an automatic generator of unstructured grids used to solve problems of aero- and hydromechanics implemented in LOGOS software complex. Stages of generating a 3D grid are considered, an example of the stage-by-stage construction of a grid is given.

УДК 004.032.24 + 004.451.23 + 004.451.34 DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 108 119

# Распараллеливание и оптимизация построения блочных расчетных сеток в препроцессоре пакета программ ЛОГОС

В. В. Лазарев

Рассматриваются способы, оптимизирующие построение блочных расчетных сеток по подготовленной декомпозиции геометрической модели на блоки. Описаны структуры данных, представляющие декомпозицию и блочные сетки. На основе этих представлений описаны распараллеленные алгоритмы построения блочной сетки. Приведены графики зависимостей эффективности распараллеливания и коэффициента ускорения от количества потоков. Разработан алгоритм, позволяющий перестраивать сетку по измененной декомпозиции только на измененных блоках. Для сеток, не помещающихся в оперативную память, предложены пофрагментные построение и запись в отдельные файлы. Построена сетка, содержащая 1 млрд ячеек. Алгоритмы реализованы и внедрены в препроцессор ЛОГОС, начиная с версии 5.1.

#### Введение

Построение блочных сеток [1] в препроцессоре пакета программ ЛОГОС [2] основывается на последовательном формировании связанных блоков вокруг геометрической модели. Назовем этот процесс декомпозицией, которая подробно описана в [3]. На основе сформированных блоков строится расчетная сетка. Декомпозиция геометрической модели в препроцессоре выполняется пользователем вручную в интерактивном режиме. Чем сложнее исходная геометрическая модель, тем дольше выполняется декомпозиция. Сложность также связана с ограничением на форму получаемых блоков: они должны быть шестигранными или четырехугольными для возможности построения на них структурированных сеток. Для оценки промежуточных результатов пользователь запускает процедуру построения сетки на сформированных блоках. Частые итерации задают ограничение на время перестроения блочной сетки: чем оно меньше, тем лучше. Способам решения этой задачи посвящена статья.

Известны аналогичные работы, выполненные в других системах построения расчетных сеток. Распараллеливание построения сеток по независимым фрагментам реализовано в программном продукте Ansys Mechanical, начиная с версии 15.0 [4]. В библиотеке Pamgen из проекта Trilinos [5] реализовано построение расчетных сеток на простых геометриях посредством их декомпозиции на блоки и построения на этих блоках независимых сеток.

Назовем множество формируемых декомпозицией блоков, описывающих исходную геометрическую модель, блочной геометрией. Блочная геометрия вместе с геометрической моделью содержат всю необходимую информацию для построения сетки. Каждый блок состоит из шести граней, грань содержит четыре ребра, а ребро — две вершины. Через введение *составных* ребер и граней реализована возможность связи двух блоков и граней по части их сторон. Более подробно такая структура описана в [3].

Блочная сетка в памяти хранится по фрагментам – с каждым блоком геометрии связана независимая структурированная сетка. Из этого представления она может быть преобразована в ячеечно-узловую или ячеечно-граневую неструктурированную сетку. Сетки на смежных блоках совпадают узел в узел вследствие того, что сначала сетка строится на границах блоков.

В статье рассматриваются четыре способа, оптимизирующие построение сетки по времени и памяти:

- 1) параллельное построение сеток по блокам;
- 2) параллельное построение сетки внутри блока;
- 3) перестроение сеток только на измененных блоках;
- 4) построение сеток на блоках с их выгрузкой в файл.

Указанные способы могут применяться как совместно друг с другом, так и по отдельности. Действие реализованных алгоритмов демонстрируется на примере построения сетки для модели корпуса устройства локализации расплава [6]. Декомпозиция модели содержит 1303 блока. Количество ячеек в сетке зависит от количества узлов на ребрах блоков. Таким образом, размер сетки может варьироваться в широких пределах.

Запуск программы осуществлялся на двух различных персональных компьютерах (ПК). Первый имеет 4-ядерный процессор Intel Core i5-2400 с частотой 3,1 ГГц и доступный объем оперативной памяти 16 Гб. Второй ПК укомплектован четырьмя 6-ядерными процессорами Intel Xeon X7542 с частотой 2,67 ГГц и доступным объемом оперативной памяти 256 Гб.

#### 1. Параллельное построение сеток по блокам

Как отмечено выше, блочная сетка в памяти хранится по фрагментам. С каждым блоком связан независимый фрагмент сетки: он может строиться на основе ранее построенных сеток на границах блоков, соседние блоки в его построении не участвуют. Это позволяет распараллелить цикл построения сетки по блокам, если сетка на границах блоков была построена. Также реализованы информирование о ходе выполняемого процесса (с указанием выполненной части в процентах) и возможность его прерывания.

Последовательность построения блочной сетки следующая. Сначала выполняется построение одномерных сеток на ребрах, затем – поверхностных сеток на гранях и только потом – объемных сеток на блоках. Объемную сетку на блоке не удастся построить, если не были построены сетки на его гранях. Аналогично: поверхностная сетка на грани не построится, если не были построены сетки на ее ребрах.

Назовем ребро, грань и блок топологическими элементами. Сетка на топологическом элементе может быть построена независимо от сеток на других элементах того же типа. Цикл построения сеток распараллеливается с помощью средств OpenMP [7] с динамическим распределением итераций цикла между потоками. Если для топологического элемента нет сетки, то строим ее и заносим в контейнер с потокобезопасной вставкой.

Измерим времена построения объемной блочной сетки с конечными размерами в 2,25; 4,58 и 8,80 млн ячеек для модели корпуса устройства локализации расплава (рис. 1, см. также цв. вкл.). Построение проводилось на описанном выше ПК с 24 процессорными ядрами. Полученные данные приведены в табл. 1.

Эффективность распараллеливания  $E_N$  и коэффициент ускорения  $Sp_N$  вычислим по формулам

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

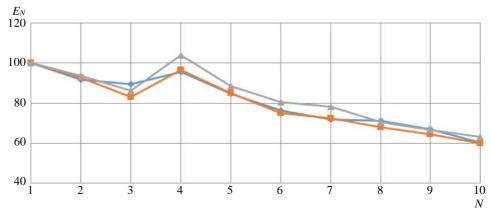
$$E_N = \frac{T_1}{T_N N} \cdot 100 \text{ %}; \quad Sp_N = \frac{T_1}{T_N},$$

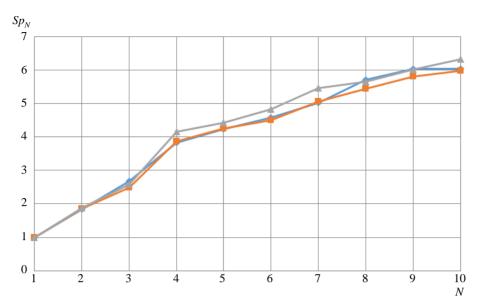
где  $T_1$ ,  $T_N$  — время решения одной и той же задачи на одном и N процессорах соответственно. На рис. 2, 3 (см. также цв. вкл.) представлены зависимости эффективности распараллеливания и коэффициента ускорения от количества потоков N по данным табл. 1.



Таблица 1 Время (в секундах) построения сетки в зависимости от ее размера и количества потоков

Размер сетки,	Количество потоков										
млн ячеек	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	24
2,25	154,2	84,1	57,4	40,3	36,4	33,6	30,7	27,0	25,5	25,5	20,4
4,58	318,0	171,3	127,7	82,3	74,7	70,6	62,7	58,3	54,7	53,1	52,2
8,80	499,6	266,3	193,0	120,2	112,6	103,3	91,3	88,4	83,0	79,0	69,3





На рассмотренном примере достигнуто ускорение в 6 раз с помощью 10 потоков с эффективностью 60 %. Можно и дальше увеличивать количество потоков до 24, но это дает максимальное ускорение до 7 раз с эффективностью 30 %. На обычных ПК с количеством ядер от 2 до 8 не имеет смысла задавать потоков больше, чем количество физических ядер в процессоре: в этом случае коэффициент ускорения перестает повышаться.

На рис. 2 выделяется пик эффективности распараллеливания для четырех потоков. Для него характерен больший коэффициент ускорения, чем ожидается от экстраполяции по предыдущим данным. Это можно объяснить следующим образом. Основное время при построении сетки тратится на коррекцию граничных узлов (вычисление их проекций на границу геометрической модели), которые составляют около 15 % от общего количества всех узлов (для сетки с 2,25 млн ячеек). Рассматриваемая геометрическая модель разбита на множество блоков, два из которых выделяются своими большими объемами. Это блоки, которые описывают вертикальную стенку корпуса (см. рис. 1). Вместе они содержат четыре большие по площади грани, на которых узлы сетки должны корректироваться. Четыре потока справляются с этим более эффективно, чем три, два или один поток.

На основе анализа этого пика можно сделать вывод, что балансировка вычислительной нагрузки встроенными средствами OpenMP не всегда эффективна. Как правило, используется дополнительная сортировка данных и их равномерное распределение по потокам. В данной работе использован другой подход, который описан в следующем разделе.

#### 2. Параллельное построение сетки внутри блока

Сетки на грани и блоке строятся от заданной границы. Границы задаются на основе фрагментов сеток, построенных ранее на ребрах или гранях для случая с блоком. Этот этап назовем сборкой границы. Так как сетки на блоках структурированные, то для их представления в памяти необходимы двумерные и трехмерные массивы узлов. Внутренние узлы сетки вычисляются ин-

терполяционным методом [8] на основе информации о граничных узлах. Чтобы распараллелить процесс вычисления внутренних узлов, выполним декомпозицию внутренней области на примерно равные по количеству узлов части (фрагменты). Опишем этот алгоритм на примере декомпозиции двумерного массива. Обобщение на трехмерный случай не вызовет затруднений.

Входными данными для алгоритма являются размеры исходного массива по двум направлениям I и J, максимальное количество фрагментов  $N_{\max}$  и минимальное количество узлов  $V_{\min}$  в фрагменте на выходе. На первом этапе алгоритма вычисляем количество фрагментов  $N = \min \left( \max \left( \frac{|I|}{|V_{\min}|}, 1 \right), N_{\max} \right)$ , где [x] — это наибольшее целое, меньшее или равное x. Здесь  $1 \le N \le N_{\max}$ . На втором этапе в цикле формируются фрагменты массива. Формирование i-го фрагмента  $\left( i = \overline{0, N-1} \right)$  осуществляется отбрасыванием части от оставшегося на данный момент массива (остатка) с размерами по направлениям I', J'. Для нулевого фрагмента остатком является исходный массив с размерами I, J. «Площадь» i-го фрагмента примерно равна «средней площади» фрагмента остатка:  $V_{fr} = \left[ \frac{I'J'}{N-i} \right]$ . При этом фрагмент «отрезается» только по «длинной стороне» остатка, и его размер по этому направлению равен  $V_{fr}/\min\left(I',J'\right)$ . Часть массива, отбрасываемая при формировании i-го фрагмента, становится остатком для процедуры формирования (i+1)-го фрагмента.

На рис. 4 представлены три примера декомпозиции двумерных массивов. Фрагменты формировались слева направо и снизу вверх.

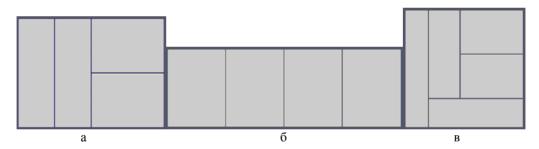


Рис. 4. Примеры декомпозиций массива: а – на 4 фрагмента при соотношении сторон 4×3; б – на 4 фрагмента при соотношении сторон 3×1; в – на 5 фрагментов при соотношении сторон 1×1

Минимальное количество узлов во фрагменте задается для того, чтобы ограничить декомпозицию при малых массивах. В противном случае много времени потеряется за счет накладных расходов OpenMP. Параметр  $V_{\min}$  варьируется в зависимости от сложности вычисления внутреннего узла. Для текущей реализации вычислений опытным путем установлено, что  $V_{\min}=100~000$ .

После определения местоположения внутренних узлов сетки происходит их проецирование на поверхность геометрической модели. Узлы между потоками распределяются средствами OpenMP.

Для определения времени построения сетки в зависимости от количества потоков воспользуемся блочной геометрией модели корпуса устройства локализации расплава. Построим на ней сетку, содержащую 8,80 млн ячеек, при общем количестве потоков N, кратном четырем (4, 8, 12, 16, 20, 24, 28). При этом количество одновременно обрабатываемых блоков  $N_b$  зададим

равным 1, 2, 4 и 8. Следовательно, внутри каждого блока может быть использовано  $N/N_b$  потоков. Результаты приведены в табл. 2.

Таблица 2 Время (в секундах) построения объемной блочной сетки в зависимости от количества потоков

Кол-во одновременно обрабатываемых	Общее количество потоков									
блоков	1	4	8	12	16	20	24	28		
1	544,7	148,9	97,8	84,5	71,5	70,5	75,3	74,6		
2	_	142,8	81,0	66,7	55,5	51,7	48,2	47,8		
4	_	123,4	74,8	64,4	50,3	41,2	40,6	38,6		
8	_	_	89,7	_	53,8	_	41,1	_		

Значения в табл. 2, закрашенные серым цветом, указывают на увеличение времени построения сетки из-за добавления новых потоков. Из табл. 2 видно, что лучший результат достигается при  $N_b = 4$  для двух и более потоков внутри блока. Дополнительным подбором параметров наименьшее время построения (37,8 с) было получено на конфигурации 5 блоков по 5 потоков. Это дало ускорение в 14,4 раза с эффективностью распараллеливания 57 %. Таким образом, удалось повысить максимальное ускорение, полученное способом 1 (см. разд. 1), более чем в два раза, не уменьшив при этом эффективности.

#### 3. Перестроение блочной сетки на измененных блоках

В ходе декомпозиции, особенно на завершающей стадии, пользовательские изменения блоков становятся локальными. В этом случае достаточно перестроить только часть сеточных фрагментов блочной сетки, что существенно ускорит получение общей результирующей сетки.

Механизм построения сетки следующий. Декомпозиция геометрии представлена связанными блоками. Каждый блок содержит топологическую и геометрическую информацию. Эта информация используется для вычисления сеточных фрагментов и объединения их в единую сетку. В ходе декомпозиции информация меняется. Появляются новые, удаляются старые блоки, некоторые из них изменяются. Изменение блока предполагает изменение связанного с ним фрагмента сетки, что приводит к его повторному перестроению. При удалении блока из декомпозиции также исключается связанный с ним сеточный фрагмент. Добавление блока приводит к добавлению нового сеточного фрагмента. Процесс приведения к согласованному состоянию блочной геометрии и сетки (синхронизация) выполняется перед каждым перестроением сетки, позволяя сохранить часть фрагментов. Основная задача, которую необходимо решить, — поиск способа, позволяющего фиксировать, накапливать и суммировать акты изменения, удаления и добавления блоков. Рассмотрим этот способ подробнее.

С каждым элементом блочной геометрии (вершиной, ребром, гранью и блоком) связано его состояние. Состояние может иметь одно из пяти значений: изменен (mod), добавлен (add), отмечен удаленным (rem), в очереди на удаление (del) и стабилен (stab). Состояния изменяются в зависимости от воздействий. Воздействия могут быть следующего типа: изменение (modify), удаление (delete), сброс состояния (reset). Изменение состояний в зависимости от воздействий представлено

на рис. 5 в виде модели конечного детерминированного автомата. Ошибочное состояние объекта отмечено как «еггог». В идеальном случае перехода к нему быть не должно. Оно возникает, если пытаются удалить или изменить удаленный ранее объект, что может быть связано с явными ошибками в программе.

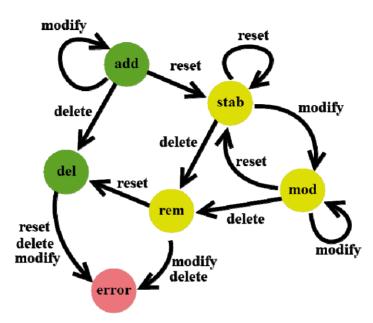


Рис. 5. Модель конечного детерминированного автомата, описывающего изменение состояния объекта

Каждый блок декомпозиции имеет свою копию рассмотренного выше автомата. Это позволяет процессу синхронизации иметь актуальные состояния для всех сеточных фрагментов. После ознакомления с состоянием блока посылается воздействие reset, что вызывает переход состояния к значению stab (стабилен) или del (в очереди на удаление).

Отметим, что предлагаемый способ может быть обобщен и на другие области применения, где есть динамически изменяющиеся объекты и стоит задача их синхронизации со связанными объектами.

Далее будет проанализировано время построения сетки для модели корпуса локализации расплава (см. рис. 1) при различных начальных условиях. Здесь под построением сетки подразумевается вычисление сеточных фрагментов на соответствующих топологических элементах, сборка фрагментов в единую неструктурированную сетку и ее визуализация. Все вычисления выполняются с использованием одного потока.

Построение объемной сетки с начального состояния, при котором сеточные фрагменты на топологических элементах полностью отсутствуют, занимает 153,1 с. На построение поверхностной сетки при таком же начальном состоянии уходит 143,1 с. Небольшая разница во времени связана с тем, что основная его часть тратится на проецирование граничных узлов сетки на поверхность геометрической модели. При существовании сеточных фрагментов на поверхностных гранях блоков картина иная: построение объемной сетки занимает всего 15,7 с. Как видно, достраивание объемной сетки по существующей поверхностной сетке выполняется в 10 раз быстрее.

Если же сетка строится по уже существующим сеточным фрагментам на всех присутствующих в ней элементах, то время построения сетки становится еще меньше: теперь оно складыва-

ется только из времени сборки неструктурированной сетки из сеточных фрагментов и времени ее визуализации. При таких условиях для объемной сетки оно равно 4 с, а для поверхностной 0,7 с. Для объемной сетки это время больше, потому что обрабатывается больший объем данных, чем в случае поверхностной сетки.

Теперь рассмотрим эффективность оптимизации в двух ситуациях – при изменении и удалении блоков. Изменение количества узлов сетки на одном ребре блока приводит к необходимости задания такого же количества на всех параллельных ребрах связанных блоков. В противном случае структурированные сетки на гранях и блоках не могут быть построены. Изменения сетки на ребре приводят к изменению сеток на связанных с ним гранях и блоках. В рассматриваемом примере после изменения количества узлов на одном ребре объемная сетка была построена за 8 с. Вторая ситуация – это удаление блоков, описывающих опоры устройства локализации расплава. После таких изменений объемная сетка была построена за 2,1 с. Удаление блоков привело к исключению сеточных фрагментов и уменьшению общего размера сетки. Это, в свою очередь, уменьшило время сборки сетки и ее визуализации. Полученное время в двух рассмотренных ситуациях является относительным и зависит от объема затронутых изменений, но в любом случае оно не превышает времени построения сетки при полном отсутствии сеточных фрагментов.

Прерывание построения сетки в середине процесса пользователем или из-за ошибки не приводит к потере промежуточных результатов. После повторного запуска работа начинается с прерванного места.

#### 4. Пофрагментное построение сетки с выгрузкой в файл

Уменьшение времени построения сетки не в полной мере решает проблему построения больших сеток. Для этого необходимо оптимизировать использование оперативной памяти. Выгрузка фрагмента построенной сетки в файл позволяет строить на ПК сетки, не помещающиеся целиком в оперативную память. Например, такие сетки характерны для моделей тепловыделяющих сборок (ТВС) атомных реакторов, в которых количество ячеек доходит до 1 млрд. Для таких случаев разработан алгоритм записи сетки в файлы по фрагментам. В препроцессоре пакета программ ЛОГОС запись для объемных сеток реализована в распределенный файл формата ЕФР [9, 10].

В общих чертах алгоритм, оптимизирующий использование оперативной памяти, выглядит следующим образом. Для каждого блока декомпозиции строится граничная сетка. На основе граничной сетки строится сетка на блоке. Построенная сетка записывается в файл и удаляется из оперативной памяти. Граничная сетка также удаляется, если на остальных смежных с ней блоках сетка уже построена. Таким образом, потребление оперативной памяти не превысит ее объема для хранения самого большого фрагмента сетки с учетом построенных, но не удаленных граничных сеток.

Запуск программы, реализующей данный способ, выполнялся на вышеописанном ПК с 4-ядерным процессором. В препроцессор были загружены исходная геометрическая модель и ее блочное представление для корпуса устройства локализации расплава (см. рис. 1). В оперативной памяти все это занимало 350 Мб. Построение сетки выполнялось в двух однопоточных режимах: 1) с формированием сетки в оперативной памяти; 2) с записью в файл по фрагментам. Активность использования ресурсов анализировалась с помощью программы Process Explorer [11].

На рис. 6 представлены иллюстрации активности использования процессора, оперативной и дисковой памяти. Для первого режима характерны полная загрузка ядра процессора, отсутствие

взаимодействия с диском и увеличивающееся потребление оперативной памяти. Участок с быстрым ростом потребления памяти связан с этапом построения объемных сеток и выделением памяти под объединенную сетку. Дальнейший горизонтальный участок связан с наполнением объединенной сетки узлами и ячейками и с визуализацией. Объем потребляемой оперативной памяти по сравнению с исходным увеличился на 650 Мб. Для режима с записью в файл по фрагментам характерны неполная и изменяющаяся во времени загрузка ядра процессора, активный вывод данных на диск и относительно постоянный объем используемой оперативной памяти на всем протяжении времени построения сетки.

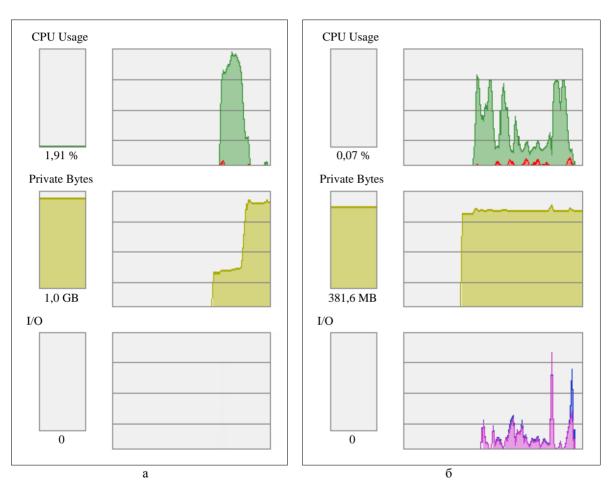


Рис. 6. Снимки экрана Process Explorer при измерении активности процесса построения сетки с записью в ОЗУ (а) и в файл (б)

Разработанный алгоритм также применялся для построения сетки на модели ТВС [12] (рис. 7).

На рис. 8 показана использованная в ТВС декомпозиция геометрии твэла на блоки [12] и связанная с ней демонстрационная блочная сетка небольшого размера. В действительности сетка состояла из 1 млрд ячеек и узлов и 3,2 млрд граней. Данные были сохранены в 8500 фрагментах общим размером занимаемого дискового пространства на 250 Гб. Время построения сетки заняло 4 часа. Пиковое потребление памяти составило 1 Гб.

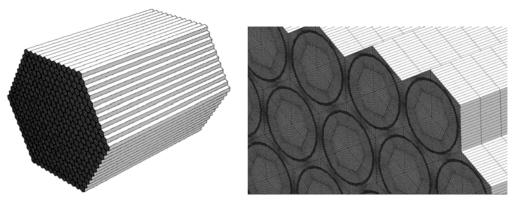


Рис. 7. Сетка на ТВС из 1 млрд ячеек

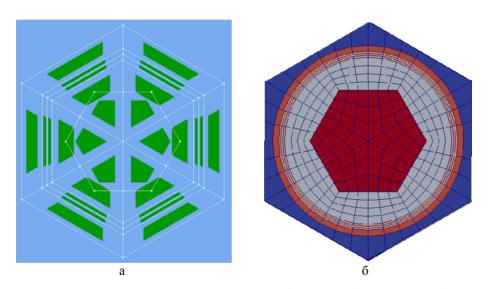


Рис. 8. Декомпозиция геометрии твэла на блоки (а) и блочная сетка (б)

#### Заключение

Предложенные четыре способа, оптимизирующие построение сетки, могут применяться как отдельно, так и в совокупности.

Совместное использование поблочного и внутриблочного распараллеливания с перестроением сеток на измененных блоках уменьшает время построение сетки до нескольких секунд вместо нескольких минут. Для случаев, когда необходимо часто перестраивать сетку, время выигрыша является существенным.

Использование пофрагментного построения сетки с выгрузкой в файл позволяет строить на ПК сетки, состоящие из 1 млрд и более ячеек. При этом максимальная загрузка оперативной памяти не превышает ее объема для хранения наибольшего сеточного фрагмента в декомпозиции геометрии.

Предложенные алгоритмы реализованы и внедрены в препроцессор ЛОГОС, начиная с версии 5.1.

#### Список литературы

- 1. Лазарев В. В., Фархутдинов В. Ф., Данилова Т. Г., Морозова Е. В. Блочные регулярные сетки в препроцессоре ЛОГОС // Сб. докл. 12-й науч.-техн. конф. «Молодежь в науке». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2014. С. 67-70.
- 2. Фархутдинов В. Ф., Тарасов В. И., Соловьев А. Н. и др. Обзор возможностей по обработке геометрий и построению сеточных моделей в ЛОГОС.ПРЕПОСТ // Тр. XIII Международ. семинара «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 524–533.
- 3. Лазарев В. В., Борисенко О. Н., Фархутдинов В. Ф. и др. Декомпозиция геометрии на шестигранные и четырехугольные блоки для построения расчетных сеток // Сб. докл. 14-й науч.-техн. конф. «Молодежь в науке». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015. С. 57–60.
- 4. Parallel Part Meshing in ANSYS Mechanical: The Need for Speed [Electronic resource]. http://www.ansys-blog.com/parallel-part-meshing-in-ansys-mechanical.
- 5. Модуль Pamgen проекта Trilinos [Электронный ресурс]. https://trilinos.org/packages/pamgen.
- 6. Российское атомное сообщество. «Атоммаш» изготовит усовершенствованную «ловушку» расплава для БалтАЭС [Электронный ресурс]. http://atomic-energy.ru/news/2012/03/07/3163/.
- 7. OpenMP Architecture Review Board [Electronic resource]. http://www.openmp.org.
- 8. Thompson J. F. Handbook of Grid Generation / Ed. by J. F. Thompson, B. K. Soni, N. P. Weatherill. New York: CRC Press, 1999.
- 9. Олесницкая К. К., Антипин И. А., Шубина М. А. Библиотека ЕФР для масштабируемого доступа к файловым данным на многопроцессорных ЭВМ // Тр. XIII Международ. семинара «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 370–379.
- 10. Олесницкая К. К., Антипин И. А., Петрова М. А. Библиотека ЕФР как средство эффективного доступа к файловым данным на гибридных вычислительных системах и суперкомпьютерах // Тр. XV Международ. семинара «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015. С. 346–354.
- 11. Process Explorer Official Webpage [Electronic resource]. https://technet.microsoft.com/en-us/sysinternals/bb896653.
- 12. Алексеев А. В., Бнятов А. В., Бочков А. И. и др. Комплекс программ CONCORD ячеечных расчетов реакторных установок на суперЭВМ // Тр. XIV Международ. семинара «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013. С. 15–27.

## Parallelization and Optimization of the Construction of Block Computational Grids in Preprocessor of LOGOS Program Package

#### V. V. Lazarev

The methods optimizing the block computational grid construction using the previously made decomposition of a geometric model into blocks are considered. Data structures representing the decomposition and block grids are described. The parallelized algorithms of constructing a block grid are described on the base of these representations. The plots of the parallelization efficiency and speedup versus the number of threads and presented. An algorithm that allows reconstructing a grid on the varied blocks only with respect to the modified decomposition into blocks has been also developed. For grids of sizes beyond the memory size, the fragment-by-fragment construction method with recording to separate files is proposed. A grid of 1 billion cells has been constructed. The developed algorithms have been implemented in the LOGOS preprocessor beginning from version 5.1.

УДК 519.6

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 120 137

## Построение трехмерной сетки на основе диаграммы Вороного в невыпуклых областях

Данная расстановка центров позволяет строить сетки в невыпуклых областях. Алгоритмы реализованы в рамках методики ТИМ.

Описан подход к построению трехмерной неструктурированной сетки на основе диаграм-

мы Вороного со специальной расстановкой центров вблизи исходной поверхностной сетки

с последующим удалением внешнего слоя ячеек.

А. А. Воропинов, С. С. Соколов, А. К. Шмелева

#### Введение

Методика ТИМ [1, 2] предназначена для решения задач механики сплошной среды на неструктурированных многоугольных и многогранных лагранжевых сетках произвольного вида методом конечных разностей. Ячейками разностной сетки могут являться произвольные несамопересекающиеся многоугольники (в двумерном случае) или многогранники (в трехмерном случае); в узлах сетки может сходиться произвольное количество ребер и граней.

С усложнением решаемых задач в трехмерной постановке традиционные методы построения сеток [3, 4] стали недостаточными. Например, листовой подход [5] позволяет построить качественную сетку у границ расчетной области, но ограничен в описании характерных особенностей трехмерной геометрической модели. У сетки, полученной методом отсечений [4], снижается качество вблизи границы отсечения за счет появления ячеек малого объема, неортогональности сетки у границ и других дефектов. Поэтому потребовался новый способ построения сетки для существенно трехмерных невыпуклых геометрий, в качестве которого был выбран подход построения сетки на основе диаграммы Вороного [6].

Классический алгоритм диаграммы Вороного предназначен для выпуклых областей. Получаемая сетка содержит только выпуклые ячейки с плоскими гранями. При этом для придания сетке специальных свойств используется особая расстановка центров ячеек [7, 8]. Задача построения диаграммы Вороного в невыпуклых областях является нетривиальной. Существует ряд алгоритмов для невыпуклых двумерных областей [9]. В трехмерном случае разработаны алгоритмы построения сеток для ряда аналитически задаваемых невыпуклых областей [10].

В данной статье рассмотрен алгоритм, предназначенный для построения трехмерной сетки на основе диаграммы Вороного в произвольных невыпуклых областях исходя из замкнутой поверхностной сетки.

#### Особенности построения диаграммы Вороного

Пусть задано множество C из n точек  $\{\vec{p}_1, \vec{p}_2, ..., \vec{p}_n\}$  в пространстве  $R^3$ . Диаграммой Вороного V(C) называется разбиение пространства на n ячеек Вороного V(i):

$$V(\vec{p}_i) = V(i) = \left\{ \vec{r} : \vec{r} \in \mathbb{R}^3, \ d(\vec{r}, \vec{p}_i) \le d(\vec{r}, \vec{p}_j), \quad j \ne i \right\}.$$

Здесь ячейка V(i) — выпуклый многогранник, являющийся пересечением полупространств  $H\left(\vec{p}_i,\vec{p}_j\right)$ , которые определяются плоскостью, делящей отрезок  $\left[\vec{p}_i,\vec{p}_j\right]$  пополам и перпендикулярной этому отрезку;  $d\left(\vec{r},\vec{p}\right)$  — расстояние между точками  $\vec{r}$  и  $\vec{p}$ .

Существует ряд алгоритмов построения диаграммы Вороного [11]. В методике ТИМ для построения сетки использован инкрементный алгоритм [12], основанный на последовательном добавлении ячеек в уже имеющуюся сетку. Данный алгоритм с применением быстрого поиска геометрической близости точек [13] имеет вычислительную сложность  $O(n \log n)$  [14].

Одним из важных свойств таких сеток является то, что, распределяя центры ячеек внутри одной и той же выпуклой области различными способами, можно получить разные сетки. Исследование различных способов распределения центров проводилось в работах [15, 16]. Наиболее часто в методике ТИМ используются равномерные распределения центров диаграммы Вороного для получения сеток из тел Вороного\* (рис. 1,a), шестигранников (рис.  $1,\delta$ ), шестиугольных призм (рис.  $1,\delta$ ).

Также можно построить сетку, в которой задано несколько распределений центров в рамках одной области. Положительным свойством такой сетки является то, что при ее построении не требуется проводить процедуру сшивания [17]. На рис. 2,a а в одной половине области построена сетка из тел Вороного, а в другой – из шестигранных ячеек. На рис.  $2,\delta$  в области задано несколько распределений шестигранных ячеек с разными расстояниями между центрами вдоль оси OX.

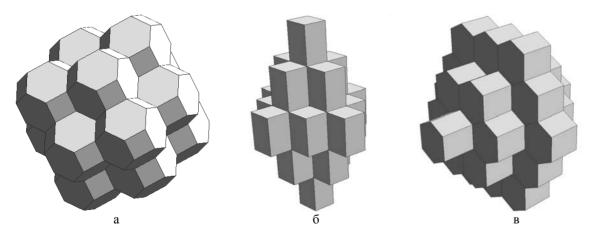


Рис. 1. Различные виды ячеек сетки: а – тела Вороного, б – шестигранники, в – шестиугольные призмы

<sup>\*</sup> Тело Вороного – четырнадцатигранник из 8 шестиугольных и 6 четырехугольных граней.

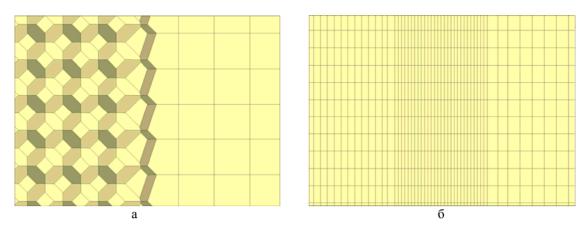


Рис. 2. Виды сеток с несколькими распределениями центров в одной области вблизи границы между распределениями: а – тела Вороного и шестигранные ячейки; б – шестигранные ячейки с разными расстояниями между центрами

При построении диаграммы Вороного могут появляться малые ребра и грани, так как в любом узле диаграммы Вороного сходится только N+1 ребро, где N- размерность пространства. Поэтому в трехмерном случае одним из требований к распределениям центров ячеек является то, чтобы никакие пять или более центров не лежали на поверхности одной сферы. Это требование ограничивает применимость алгоритмов диаграммы Вороного для построения, например, шестигранной сетки (рис. 3,a). С помощью диаграммы Вороного можно построить только сетки, близкие к шестигранным (рис. 3,b).

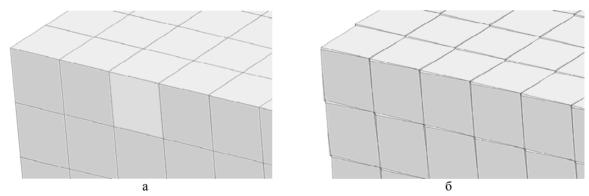


Рис. 3. Фрагменты сеток: а – на основе диаграммы Вороного с равномерной расстановкой центров ячеек; б – диаграммы Вороного с расстановкой центров ячеек, близкой к равномерной

Данная проблема актуальна при построении диаграммы Вороного не только для равномерных распределений центров. Перечисленные недостатки ограничивают область применения классической диаграммы Вороного для расчета задач, снижая качество расчетной сетки из-за наличия элементов (ребер, граней) существенно разного размера.

Для решения указанной проблемы в данной работе при построении ячеек Вороного не допускается возникновения малых граней и ребер. Малые грани и ребра могут возникать при добавлении очередной ячейки и рассечении срединно-перпендикулярной плоскостью ячеек, построенных ранее. В случае, если площадь грани мала, рассечение выполняется через ближайшее ребро или узел. В связи с этим получаемая сетка не является в строгом смысле диаграммой Вороного, поэтому в дальнейшем будем ее называть сеткой на основе диаграммы Вороного.

#### 3. Особенности метода

Предлагается метод построения сетки на основе диаграммы Вороного в произвольной невыпуклой области с использованием исходной поверхностной сетки. По отношению к строящейся объемной сетке ячейки поверхностной сетки являются гранями. Так и будем называть их в дальнейшем для отличия от ячеек объемной сетки.

Учет невыпуклости области достигается с помощью специальной расстановки центров ячеек вдоль поверхностной сетки (центры расставляются попарно, на одинаковом расстоянии с внешней и внутренней сторон от поверхностной сетки), что приводит к отсутствию невыпуклых ячеек вблизи границы сетки. Исходная поверхностная сетка может иметь произвольную структуру, но должна быть замкнутой, не содержать вырожденных граней и ребер, не иметь самопересечений. Для описания структуры поверхности сетки используется реберно-ячеечный формат [18]. Направление обхода грани должно быть против часовой стрелки, если смотреть снаружи.

Для построения сетки на основе диаграммы Вороного, кроме исходной поверхностной сетки, в качестве начальных данных задаются:

- от ступ  $\Delta$  от поверхности для определения положения центров ячеек;
- число слоев центров ячеек вдоль поверхности внутри геометрии (для построения сетки приграничного слоя) [19];
  - количество центров внутренних ячеек и тип их распределения.

Основными этапами построения объемной сетки на основе диаграммы Вороного в невыпуклой области являются:

- 1. Анализ и измельчение граней исходной поверхностной сетки.
- 2. Расстановка центров ячеек с учетом поверхностной сетки.
- 3. Построение сетки на основе диаграммы Вороного в выпуклой области.
- 4. Удаление внешнего слоя ячеек.
- 5. Преобразования полученной сетки на границе.

#### Анализ и измельчение граней поверхностной сетки

При построении сетки на основе диаграммы Вороного для вычисления центров ячеек у ее границы используются данные об исходной поверхностной сетке, поэтому от качества последней напрямую зависит качество результирующей объемной сетки. Наилучшим образом зарекомендовали себя поверхностные сетки, грани которых близки к правильным фигурам и имеют примерно одинаковые размеры (площади). Но поскольку предполагается, что поверхностная сетка совершенно произвольна по форме и размеру граней, то необходимо ее преобразовать так, чтобы привести грани к более единообразному виду. Так как ухудшение описания поверхности не допускается (за счет объединения поверхностных граней), то возможно только дробление некоторых граней на более мелкие. Рассмотрим несколько типов такого дробления.

**Дробление больших граней.** Для граней большой площади осуществляется дробление на четырехугольники путем соединения центра грани и центров ребер.

Считается, что грань i имеет большую площадь, если ее площадь  $S_i$  удовлетворяет условию  $S_i > 4\sum_{j=1}^{k_i} S_j / k_i \quad (k_i - \text{число смежных по узлам и ребрам граней для грани } i).$ 

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Дробление на четырехугольники также выполняется для относительно крупных граней, для которых  $S_i > 1.5 \sum_{j=1}^k S_j / k$  (k — общее число граней поверхностной сетки) и которые относятся к *тонким* участкам геометрии, заданной поверхностной сеткой.

Рассмотрим критерии определения тонких участков на примере двух граней  $F_m$   $(m=1,\,2),$  содержащих  $k_m$  узлов с радиусами-векторами  $\vec{V}_{m\ i},\ i=1,...,k_m$  (рис. 4).

Для этих граней определяются радиусы-векторы их центров:  $\vec{C}_m = \sum_{i=1}^{k_m} \vec{V}_{mi} / k_m$  .

Далее определяются нормали к граням

$$\bar{n}_m = \frac{\sum_{i=1}^{k_m} \bar{n}_{mi} S_{mi}}{\sum_{i=1}^{k_m} S_{mi}}, \quad m = 1, 2.$$

Здесь  $\vec{n}_{m\,i} = \vec{R}_{m1} \times \vec{R}_{m2}$  — вектор нормали для узла  $\vec{V}_{mi}$ , где  $\vec{R}_{m1} = \vec{V}_{mi+1} - \vec{V}_{mi-1}$ ;  $\vec{R}_{m2} = \vec{C}_m - \vec{V}_{mi}$ ;  $S_{mi} = |\vec{n}_{mi}|$  — площадь параллелограмма, построенного на векторах  $\vec{R}_{m1}$  и  $\vec{R}_{m2}$ .

Нормированные векторы нормалей к граням

$$\vec{N}_m = \frac{\vec{n}_m}{|\vec{n}_m|}, \quad m = 1, 2.$$

Положение точек  $\vec{P}_{1\pm}$ ,  $\vec{P}_{2\pm}$  определяется по формуле

$$\vec{P}_{m\pm} = \vec{C}_m \pm \Delta \vec{N}_m, \quad m = 1, 2.$$

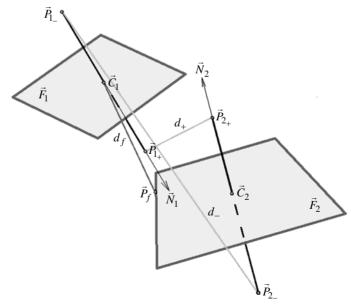


Рис. 4. Определение тонких участков геометрии, заданной поверхностной сеткой

Если центр грани  $\vec{C}_1$  – внутренний для грани  $F_2$  (лежит в том же полупространстве, ограниченном гранью  $F_2$ , что и точка  $\vec{P}_{2+}$ ), то находим ближайшую к  $\vec{C}_1$  точку  $\vec{P}_f$ , принадлежащую грани  $F_2$ . Вычисляем значения функции  $d(\vec{x}, \vec{y})$ , определяющей расстояние между двумя точками:

$$\begin{split} d_f &= d\left(\vec{C}_1, \vec{P}_f\right); \\ d_+ &= d\left(\vec{P}_{1_+}, \vec{P}_{2_+}\right); \quad d_- &= d\left(\vec{P}_{1_-}, \vec{P}_{2_-}\right). \end{split}$$

При  $d_f > \min(d_+, d_-)$  обе грани  $F_1$  и  $F_2$  подлежат дроблению.

Следует отметить, что для всей поверхностной сетки данные оценки осуществляются с использованием алгоритма быстрого поиска геометрической близости точек [13].

**Дробление вытянутых граней.** Дробление вытянутых граней осуществляется поперек максимальной диагонали и приводит к более равномерному распределению центров при построении сетки и более качественному описанию изломов. Для оценки степени вытянутости грани вычисляется значение  $l = \frac{S}{Ad_{\max}}$ , где A – периметр, S – площадь,  $d_{\max}$  – длина максимальной диагонали

рассматриваемой грани. Практика показала, что для получения лучшего качества сетки достаточно проводить дробление граней при значении l < 0.05.

**Триангуляция неплоских граней.** Грани поверхностной сетки могут быть неплоскими. Для построения на их основе ячеек, корректно описывающих границу будущей сетки, необходимо привести такие грани к плоскому виду, чтобы однозначно опередить положение центров ячеек, получаемых от этих граней.

Так как триангуляция всей поверхностной сетки может существенно увеличить число граней поверхности, проводится оценка кривизны грани. Для этого попарно рассматриваются треугольники, построенные по ребру и центру грани. Если хотя бы один угол между нормалями к плоскостям таких треугольников превышает заданный угол  $\alpha = 5^{\circ}$ , грань триангулируется. Триангуляция грани проводится путем соединения центра грани и ее вершин (рис. 5).

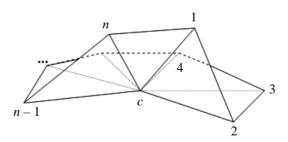


Рис. 5. Триангуляция неплоской грани: 1, 2, ..., n – вершины; c – центр грани

#### Расстановка центров ячеек с учетом поверхностной сетки

Назовем центры ячеек, полученные с помощью информации об исходной поверхностной сетке, *основными центрами*. Чтобы добиться качественного описания границы области, эти цен-

тры расставляются парами на одинаковом расстоянии от центров граней поверхностной сетки вдоль направлений внешней и внутренней нормалей. Грань, с помощью которой получены координаты каждой из пар центров, назовем *материнской гранью* для этих центров.

Для некоторых задач необходимо, чтобы в приграничной области сетка была равномерной. Этого можно добиться построением нескольких внутренних слоев у границы. Центры приграничных слоев также определяются исходя из положения исходной поверхностной сетки, т. е. являются основными.

На рисунке рис. 6 схематично показано расположение центров ячеек для двумерного случая с построением сетки в невыпуклой области. Серым цветом обозначена внешняя относительно исходной поверхностной сетки часть пространства, белым – внутренняя. Основные центры на рисунке обозначены крестиками. В данном примере имеется два приграничных слоя. Направления нормалей обозначены стрелками, проходящими через основные центры и центры граней поверхностной сетки.

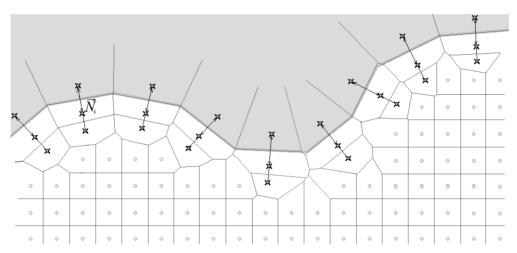


Рис. 6. Расположение центров ячеек и построенная сетка на основе диаграммы Вороного

Основные центры, расположенные снаружи от материнских граней, назовем *внешними*, центры, расположенные внутри, – *внутренними*.

Дополнительные центры – центры, получаемые с помощью различных распределений, расположенные с внутренней стороны от поверхностной сетки и не влияющие на построение границы сетки (на рис. 6 обозначены серыми точками).

Ячейки сетки на основе диаграммы Вороного, полученные от внутренних основных или дополнительных центров, назовем *внутренними*, ячейки, полученные от внешних основных центров, – *внешними*.

Вычисление координам основных центров. Одним из входных параметров для построения объемной сетки является значение отступа  $\Delta$  от поверхностной сетки, задаваемое пользователем. Его геометрический смысл — толщина граничных ячеек объемной сетки. Заданное значение отступа не всегда является приемлемым для построения сетки: при больших значениях  $\Delta$  ячейки объемной сетки у границы могут получаться слишком вытянутыми. Чтобы избежать подобной ситуации, вводится ограничитель сверху  $\beta$  для вычисления расстояния от основных центров до поверхностной сетки.

Пусть исходная поверхностная сетка состоит из k граней и m ребер. В качестве верхнего ограничителя  $\beta$  выбирается половина средней длины ребра поверхностной сетки:

#### ПОСТРОЕНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ СЕТКИ НА ОСНОВЕ ДИАГРАММЫ ВОРОНОГО В НЕВЫПУКЛЫХ ОБЛАСТЯХ

$$\beta = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} d\left(\vec{V}_{ai}, \vec{V}_{bi}\right),$$

где  $\vec{V}_{ai}$  и  $\vec{V}_{bi}$  – радиусы-векторы узлов ребра i. Тогда откорректированное значение отступа от поверхностной сетки определяется выражением

$$\delta = \min(\Delta, \beta). \tag{1}$$

Для локальной оценки положения основных центров относительно друг друга рассмотрим пару центров, полученную от грани i (i=1,...,k). Координаты основных центров  $\vec{P}_{i\pm}$  определяются по формуле

$$\vec{P}_{i\pm} = \vec{C}_i \pm \delta \vec{N}_i. \tag{2}$$

Здесь  $\vec{C}_i$  — радиус-вектор центра грани; индекс со знаком «+» означает внутренний центр, со знаком «—» — внешний.

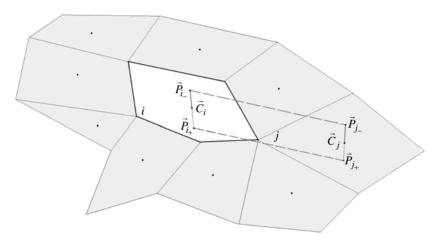


Рис. 7. Оценка расстояний между центрами

Для центров  $\vec{P}_{i\pm}$  рассматриваются центры смежных по узлам и ребрам граней  $j=1,...,k_i$  (рис. 7). Определяются значения

$$\alpha_{ij} = \min\left(d\left(\vec{P}_{i_+}, \vec{P}_{j_+}\right), d\left(\vec{P}_{i_-}, \vec{P}_{j_-}\right)\right).$$

Согласно определению основных центров и формулам (1), (2)

$$2\delta = d(\vec{P}_{i_{+}}, \vec{P}_{i_{-}}) = d(\vec{P}_{j_{+}}, \vec{P}_{j_{-}}).$$

Для корректного построения сетки у границы необходимо выполнение условия

$$2\delta < \alpha_{ij}, \quad j = 1, \dots, k_i. \tag{3}$$

Чтобы условие (3) выполнялось для каждой грани i, вводятся следующие значения:

$$\lambda_i = \min\left(1; 0, 45 \frac{\alpha_{ij}}{\delta}\right), \quad i = 1, ..., k; \quad j = 1, ..., k_i.$$

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Из формулы (2) и на основе полученного локального значения  $\delta_i = \lambda_i \delta$  вычисляются координаты основных центров:

$$\vec{P}'_{i+} = \vec{C}_i \pm \delta_i \vec{N}_i, \quad i = 1, ..., k.$$

Обобщение данной формулы для L приграничных слоев выглядит следующим образом:

$$\vec{P}'_{im} = \vec{C}_i + m\delta_i \vec{N}_i, \quad i = 1, ..., k, \quad m = 1, ..., L.$$

**Дополнительные центры.** Формирование списка дополнительных центров проходит в три этапа:

1. Генерируется набор заданного числа центров согласно их типу распределения в *габарит-ном параллелепипеде*, содержащем все основные центры. Грани габаритного параллелепипеда параллельны координатным плоскостям, а угловые точки определяются как

$$\vec{S}_{\max} = \max_{i} \vec{C}_{i} + 1,5\delta; \quad \vec{S}_{\min} = \min_{i} \vec{C}_{i} - 1,5\delta; \quad i = 1,...,k.$$

- 2. Чтобы центры, лежащие вблизи поверхностной сетки, не оказывали влияния на границу будущей объемной сетки, они удаляются. С этой целью для каждого дополнительного центра вычисляются расстояния до близлежащих граней поверхностной сетки. Если минимальное из этих расстояний  $d_f \leq (1+L)\delta$ , то считается, что рассматриваемый дополнительный центр лежит слишком близко к поверхностной сетке, поэтому он исключается.
- 3. Выполняется фильтрация дополнительных центров, которая заключается в следующем. По известному номеру ближайшей поверхностной грани F с узлами  $\vec{V}_i$ ,  $i=1,...,k_i$ , для рассматриваемого дополнительного центра вычисляется значение

$$r_1 = \frac{1}{3} \left( d\left(\vec{V}_i, \vec{V}_{i-1}\right) + d\left(\vec{V}_i, \vec{V}_{i+1}\right) + d\left(\vec{V}_{i-1}, \vec{V}_{i+1}\right) \right).$$

Затем определяется  $r = \max(r_1, \delta(1+L))$ .

Рассматриваются три точки:

$$\vec{P}_1 = \vec{V}_i + r\vec{n}_i; \quad \vec{P}_2 = \vec{V}_{i+1} + r\vec{n}_{i+1}; \quad \vec{P}_3 = \vec{V}_{i-1} + r\vec{n}_{i-1},$$
 (4)

где  $\vec{n}_i$  – вектор нормали для  $\vec{V}_i$ , направленный внутрь от поверхностной сетки.

Дополнительный центр исключается из дальнейшего рассмотрения, если он находится с текущим узлом  $\vec{V_i}$ ,  $i=1,...,k_i$ , в одном полупространстве относительно плоскости, проходящей через три точки, определенные по формуле (4).

**Обработка щелей.** В исходной поверхностной сетке в окрестности излома возможно наличие узких пустот – *щелей*. Под щелью подразумевается совокупность граней поверхностной сетки, основные внешние центры для которых расположены внутри области построения.

В двумерном случае щель схематично представлена на рис. 8,a. При построении сетки на основе диаграммы Вороного граница области около щели может быть описана некачественно (рис. 8,6: белым цветом показаны внутренние ячейки, серым — внешние). Как видно из рис. 8,6, ячейки с внешними центрами занимают существенный объем внутри области построения. Поскольку при построении сетки на основе диаграммы Вороного в невыпуклой области такие ячейки отбрасываются, это приводит к увеличению размера щели в построенной сетке. Так как щель имеет малый объем, то такую особенность можно считать дефектом исходной поверхностной сетки

и игнорировать при построении объемной сетки. Для этого удаляются основные центры для граней вблизи щели. В результате качество сетки улучшается (рис. 8,8).

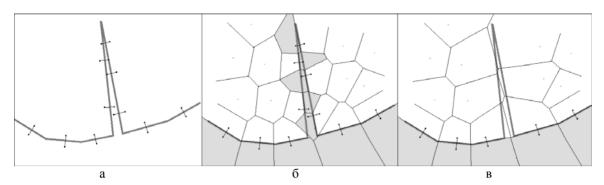


Рис. 8. Обработка щели в двумерном случае: а — щель и центры диаграммы Вороного; б — сетка на основе диаграммы Вороного, построенная для указанного набора центров; в — сетка с удаленными в окрестности щели центрами

Чтобы определить, какие центры нужно удалить, рассматриваются точки

$$\vec{P}_i = \vec{P}_i - 10\delta_i \vec{N}_i, \quad i = 1, ..., k.$$

Если точка  $\vec{P}_i$  лежит внутри тела, ограниченного поверхностной сеткой, то набор центров  $\vec{P}_{i\pm}$ ,  $\vec{P}_{im}$  не учитывается при построении сетки, а материнская для этих центров грань i считается гранью щели и не принимается во внимание при корректировке объемной сетки на последующих шагах алгоритма.

#### Построение сетки на основе диаграммы Вороного в выпуклой области

По полученному набору основных и дополнительных центров строится сетка на основе диаграммы Вороного в габаритном параллелепипеде.

При этом снимается ограничение на фиксированное количество связей в узлах классической диаграммы Вороного (что возможно благодаря формату хранения данных *по граням* [20] методики ТИМ) и допускается удаление граней малой площади и коротких ребер в процессе построения сетки. Это улучшает качество сетки.

В трехмерном случае проводится оценка площади грани относительно всех граней двух объемных ячеек, которые она разделяет. Грань преобразуется в узел или ребро (рис. 9, 10), если ее площадь  $S_F$  удовлетворяет условию

$$S_F < \frac{10^{-8}}{k_m} \sum_{i=1}^{k_m} S_{F_i}, \quad m = 1, 2,$$

где  $k_m$  — число граней m-й ячейки.

Процедура удаления малых граней может привести к тому, что грани вблизи удаляемых элементов станут неплоскими.

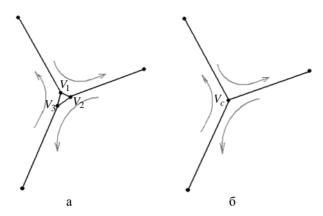


Рис. 9. Фрагмент сетки в процессе преобразования малой грани в узел: а – до удаления малой грани, б – после удаления

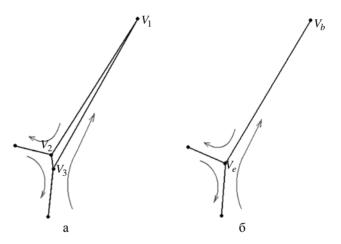


Рис. 10. Фрагмент сетки в процессе преобразования малой грани в ребро: a- до удаления вытянутой малой грани,; б- после удаления

**Преобразования сетки у изломов.** Для более качественного описания границы объемной сетки определяются линии излома. *Линия излома* — непрерывная линия из ребер поверхностной сетки, разделяющих грани, двугранный угол между которыми менее  $150^{\circ}$ . На рис. 11,a показан фрагмент объемной сетки, состоящей из внутренних ячеек и построенной на изломах поверхностной сетки (линии излома выделены черным цветом).

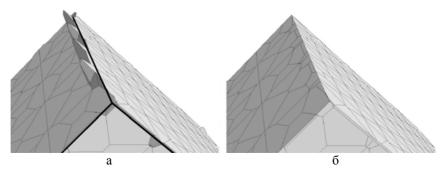


Рис. 11. Фрагменты построенной объемной сетки: a – без отсечений на линиях излома, б – после отсечений

На этапе анализа поверхностной сетки запоминаются ее грани, образующие линии излома. После построения объемной сетки в выпуклой области выполняются отсечения ячеек – как внутренних, так и внешних, материнские грани которых примыкают к линиям излома. Отсечения проводятся гранями исходной поверхностной сетки, имеющими с рассматриваемой материнской гранью общее ребро или узел на линии излома. Каждое последующее отсечение затрагивает все уже полученные ячейки-фрагменты, относящиеся к рассматриваемой материнской грани. После выполнения всех отсечений внутренняя ячейка формируется заново как объединение всех внутренних ячеек-фрагментов, полученных для одной материнской грани (рис. 11,6).

Обработка ячеек вблизи щелей. К некоторым линиям излома могут примыкать щели. Способ обработки ячеек вблизи линии излома, находящихся близко к щели, меняется. Близкими к щели считаются ячейки, построенные для граней исходной поверхностной сетки, расположенные в двух уровнях соседства от граней щели. Для этих ячеек выполняются поиск ближайших граней, не относящихся к щели, и отсечения найденными гранями.

Рассмотрим пример построения трехмерной сетки вблизи щели. На рис. 12,a показан фрагмент сетки, полученной без обработки щели. На рис. 13,a — серия сечений полученной сетки. Видно, что у границы сетка описывается некачественно (граница сетки выделена черным контуром). На рис. 12,6 сетка построена с обработкой щели. На рис. 13,6 показана серия сечений для этой сетки.

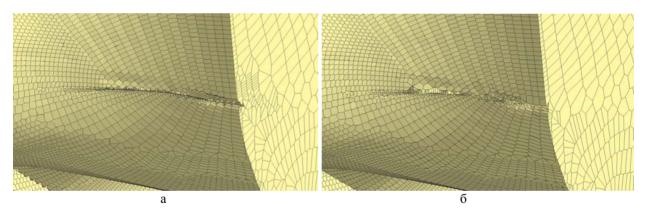


Рис. 12. Фрагменты поверхностей построенных сеток: а – без обработки щели, б – с обработкой щели

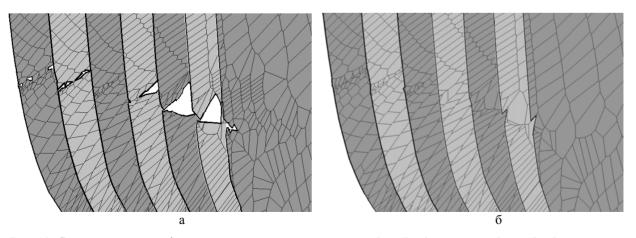


Рис. 13. Серия сечений для фрагментов построенных сеток: а – без обработки щели, б – с обработкой щели

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Для оценки качества каждой из сеток вычисляется дисбаланс объема

$$\varepsilon_W = \frac{W_s - W_k}{W_s} \cdot 100 \%, \tag{5}$$

где  $W_s$  — объем тела, ограниченного поверхностной сеткой;  $W_k$  — объем, занимаемый построенной сеткой. Например, для сетки, представленной на рис. 12,a и 13,a, построенной без обработки щели,  $\varepsilon_{W_1}$  = 0,0526 %; для сетки на рис. 12, $\delta$  и 13, $\delta$ , построенной с обработкой щели,  $\varepsilon_{W_2}$  = 0,0052 %.

#### Удаление внешнего слоя ячеек

После построения сетки на основе диаграммы Вороного внешние ячейки из сетки удаляются, также удаляются грани и узлы, образованные только внешними ячейками.

Полученная в результате удаления внешнего слоя ячеек сетка уже хорошо описывает геометрию, однако может обладать негладкой границей.

#### Корректировка границы объемной сетки

В полученной сетке может возникать *ступенчатость границы* — дефект сетки, заключающийся в чередовании относительно крупных и мелких граней на поверхности с углом между векторами нормалей к граням, близким к 90°. Для устранения этого дефекта граница полученной сетки корректируется путем трансформации малых граней в узел, ребро или совокупность ребер в зависимости от формы грани. На рис. 14 показан фрагмент границы объемной сетки до и после удаления мелких граней. Трансформируемые грани выделены темным цветом.

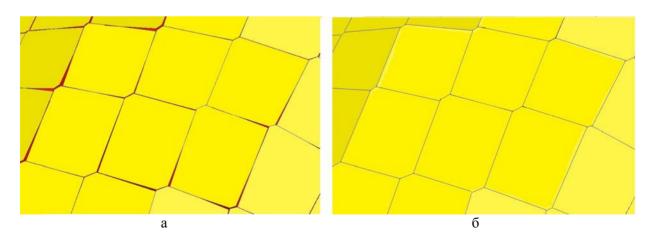


Рис. 14. Фрагмент сетки в процессе корректировки границ: а – до удаления мелких граней, б – после удаления

#### Пример изменения формы граничных ячеек

В процессе построения и преобразования объемной сетки происходит неоднократное ее изменение: сначала выполняется построение сетки в выпуклой области, затем проводятся отсечения ячеек у линий излома, отбрасывается внешний слой ячеек и проводится корректировка границы сетки. В результате таких преобразований форма ячеек на границе также может сильно изменяться.

Пример изменения формы ячейки на границе сетки продемонстрирован на рис. 15. Фрагмент исходной поверхностной сетки показан на рис. 15,a. Рассмотрим ячейку, построенную для выделенной на рис. 15,a материнской грани. На рис. 15, $\delta$  показаны ячейки, построенные от основных центров. Для рассматриваемой грани построена выделенная на рис. 15, $\delta$  ячейка из 8 граней. Вид этого же фрагмента сетки после отсечений ячеек у линии излома и удаления слоя внешних ячеек показан на рис. 15, $\epsilon$ . Рассматриваемая ячейка теперь состоит из 11 граней. Окончательный вид фрагмента сетки после удаления мелких граней и ребер — на рис. 15, $\epsilon$ . После последнего этапа рассматриваемая ячейка состоит из 9 граней.

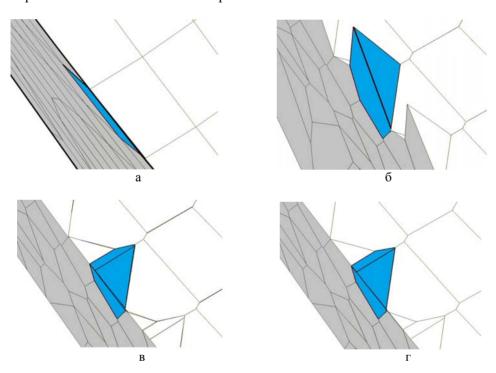


Рис. 15. Процесс преобразования фрагмента сетки у границы: а – исходная поверхностная сетка, б – объемная сетка без преобразований, в – объемная сетка после отсечений на изломах,  $\Gamma$  – объемная сетка после корректировки границы

## Примеры построения трехмерных сеток на основе диаграммы Вороного для невыпуклых областей

**Построение сетки для поршня**. Габаритные размеры поршня 254×255×254 (рис. 16,*a*). Исходная поверхностная сетка состоит из 2200 треугольных и четырехугольных граней. Сетка имеет большое число изломов.

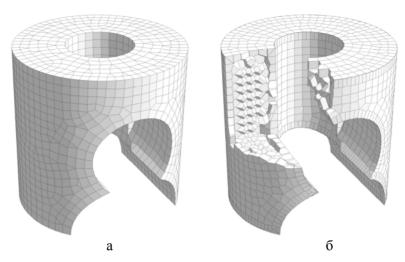


Рис. 16. Построение объемной сетки для поршня: а – исходная поверхностная сетка, б – фрагмент полученной сетки на основе диаграммы Вороного

Изначально было задано  $\Delta=2,0$ . Исходя из этого значения был определен параметр  $\delta=1,41$ . Для построения трехмерной сетки использовалось распределение внутренних центров тел Вороного  $25\times25\times50$ .

Общее число ячеек построенной сетки 7407 (рис.  $16,\delta$ ). Время построения сетки составило 10,5 с. Дисбаланс объема, вычисленный по формуле (5), составил  $\varepsilon_W = 3,19 \cdot 10^{-4}\%$ .

**Построение сетки для составной конструкции.** Габаритные размеры конструкции  $0.78 \times 0.5 \times 0.5$  (рис. 17,а). Исходная поверхностная сетка состоит из 34440 четырехугольных граней.

Заданное начальное значение  $\Delta = 5 \cdot 10^{-3}$  удовлетворяло условиям построения сетки, поэтому  $\delta = \Delta = 5 \cdot 10^{-3}$ . Для построения сетки использовалось распределение внутренних центров тел Вороного  $100 \times 70 \times 140$ .

Построенная объемная сетка (рис. 17,6) состоит из 327976 ячеек. Ее фрагмент показан на рис. 17,8. Общее время построения 413 с. Дисбаланс объема  $\varepsilon_W = 2,94 \cdot 10^{-3}$  %.

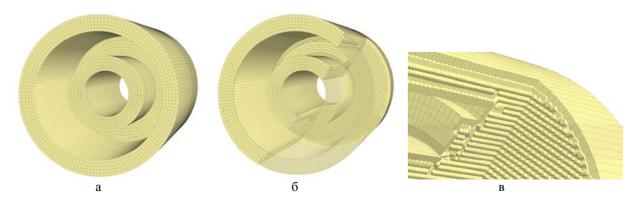


Рис. 17. Построение объемной сетки для составной конструкции: а – исходная поверхностная сетка, б – фрагмент полученной сетки на основе диаграммы Вороного, в – увеличенный фрагмент объемной сетки вблизи границы

**Построение сетки в деформированной области.** Габаритные размеры  $19,77 \times 19,98 \times 10,6$ . Поверхностная сетка для области (рис. 18,a) состоит из 27412 четырехугольных граней.

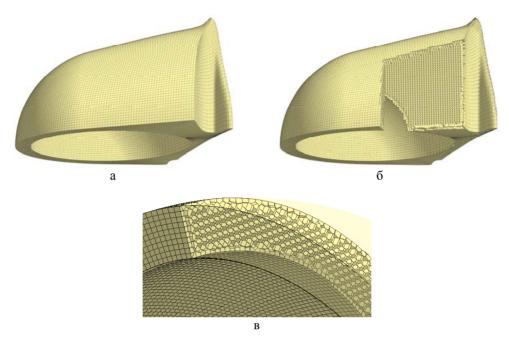


Рис. 18. Построение объемной сетки для деформированной области: а – исходная поверхностная сетка, б – фрагмент полученной сетки на основе диаграммы Вороного, в – увеличенный фрагмент объемной сетки вблизи границы

Сначала было выполнено преобразование поверхностной сетки: дробление вытянутых граней (127 граней) и триангуляция неплоских граней (240 граней). Преобразованная поверхностная сетка состояла из 28259 граней.

Исходя из заданного начального значения  $\Delta = 5 \cdot 10^{-2}$  был определен параметр  $\delta = 9,657 \cdot 10^{-3}$ . Для построения сетки использовалось распределение внутренних центров тел Вороного  $100 \times 100 \times 110$ .

Общее число ячеек построенной сетки составило 227521. Пример фрагмента построенной сетки показан на рис. 18, $\delta$ , на рис. 18, $\epsilon$  – увеличенный фрагмент этой сетки вблизи границы. Общее время построения сетки 351 с. Дисбаланс объема  $\epsilon_W = 7,93 \cdot 10^{-4}$ %.

#### Заключение

Описан метод построения трехмерных неструктурированных сеток на основе диаграммы Вороного в области, задаваемой произвольной замкнутой поверхностной сеткой, который позволяет получать сетки для широкого набора сложных трехмерных геометрий. Особенностью метода является учет невыпуклости начальной геометрии за счет специальной расстановки центров ячеек диаграммы Вороного вблизи исходной поверхности, учета линий излома и дефектов поверхностной сетки в виде щелей. Метод успешно применяется при построении многогранных сеток в методике ТИМ.

#### Список литературы

- 1. Соколов С. С., Панов А. И., Воропинов А. А. и др. Методика ТИМ расчета трехмерных задач механики сплошных сред на неструктурированных многогранных лагранжевых сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2005. Вып. 3. С. 37–52.
- 2. Соколов С. С., Воропинов А. А., Новиков И. Г. и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2006. Вып. 4. С. 29–43.
- 3. Воропинов А. А., Соколов С. С. Алгоритмы построения нерегулярной многогранной сетки для методики ТИМ // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2010. Вып. 15. С. 98–113.
- 4. Фархутдинов В. Ф., Тарасов В. И., Соловьев А. Н. и др. Обзор возможностей по обработке геометрических и построению сеточных моделей в Логос-ПреПост // Тр. XIV Международ. семинара «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013. С. 585—592.
- 5. Воропинов А. А., Соколов С. С., Панов А. И. Методика построения многогранной листовой сетки на основе многоугольной нерегулярной сетки // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2005. Вып. 4. С. 46–52.
- 6. Вороной Г. Ф. Собрание сочинений. Т. 2. Киев: Изд-во АН УССР, 1952.
- 7. Jie Y., Fu X., Lin Y. Mesh generation for FEM based on centroidal Voronoi tessellation // Mathematics and Computers in Simulation. 2014. N 97. P. 68–79.
- 8. Kobayashi M., Maekawa H., Kondou Y. Automatic discretization of a three-dimensional domain into Voronoi polyhedron elements // JSME Int. Journal. 1992. Vol. 35, N 3. P. 337–345.
- 9. Okape A., Boots B., Sugihara K., Chiu S. N. Spatial tessellation: concept and applications of Voronoi diagrams. Chichester, West Sussex, England: John Wiley & Sons, 1999.
- 10. Recroft C. Voro++: a three-dimensional Voronoi cell library in C++, 2009 [Electronic resource]. http://www.math.lbl.gov/voro++.
- 11. Гордеев Э. Н. Диаграмма Вороного: обзор // Распознавание, классификация, прогноз. Математические методы и их применение. Вып. 4. М.: Наука, 1992. С. 41–67.
- 12. Препарата Ф., Шеймос М. Вычислительная геометрия: введение. М.: Мир, 1989.
- 13. Шмелева А. К., Воропинов А. А., Шурыгин А. В., Новиков И. Г. Алгоритм ускорения поиска геометрической близости точек для построения неструктурированных сеток // Вестник Саровского физтеха. 2011. № 17. С. 37 43.
- 14. Воропинов А. А. Методы решения задач газодинамики на неструктурированных сетках: курс лекций. Ч. 1. Алгоритмы построения начальных сеток. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012.
- 15. Du Q., Gunzburger M. Grid generation and optimization based on centroidal Voronoi tessellations // Appl. Math. and Computation. 2002. N 133. P. 591–607.
- 16. Ohya T., Iri M., Murota K. Improvements of the incremental methods for the Voronoi diagram with computational comparison of various algorithms // J. of Operations Res. Society of Japan. 1984. N 27. P. 306–336.

- 17. Соболев И. В., Шурыгин А. В. Сшивание многогранных неструктурированных сеток в методике ТИМ-3D // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2015. Вып. 3. С. 35–45.
- 18. Воропинов А. А. Некоторые форматы данных для представления двумерных неструктурированных сеток произвольного вида // Там же. 2010. Вып. 4. С. 52–63.
- 19. Шмелева А. К., Воропинов А. А. Алгоритмы построения трехмерных неструктурированных сеток на основе поверхностной сетки для методики ТИМ // Тезисы докл. XVI Международ. конф. «Супервычисления и математическое моделирование». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2016. С. 133–134.
- 20. Воропинов А. А., Соколов С. С., Панов А. И., Новиков И. Г. Формат для описания нерегулярной многогранной сетки произвольной структуры в методике ТИМ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2007. Вып. 3–4. С. 55–63.

## Building a 3D Grid Based on the Voronoy Diagram in Nonconvex Regions

A. A. Voropinov, S. S. Sokolov, A. K. Shmelyova

The paper describes an approach to building a 3D unstructured grid based on the Voronoy diagram with a special arrangement of the grid cell centers near the original surface grid followed by removal of the outer layers of cells. Such approach to the arrangement of centers allows constructing grids in nonconvex regions. Algorithms are implemented in the TIM code.

УДК 539.89

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 138 161

### Модель источника ударно-волнового пыления металлов, основанная на теории развития неустойчивости Рихтмайера — Мешкова

Приведено решение задачи о влиянии профиля ударной волны на пространственно-временное распределение скорости, плотности и массы выброшенных со свободной поверхности частиц вещества. Показано, что в жидком фазовом состоянии вещества амплитуда ударной волны не оказывает влияния на выброшенную массу вещества, которая определяется соотношением  $\beta = k^2 a_0 \Delta x$  ( $a_0 - a_0 - a_$ 

А. Б. Георгиевская<sup>1,2</sup>, В. А. Раевский<sup>1</sup>

#### Введение

Выход ударной волны на свободную поверхность конденсированного вещества, граничащего с вакуумом или газом, как правило, приводит к выбросу частиц, движущихся со скоростями, превышающими скорость поверхности разгруженного вещества. Впервые это явление было обнаружено в России в 1950-х гг. сотрудниками ВНИИЭФ Кормером С. Б. и Григорьевым Ф. В. Исследования проводились с помощью фотохронографической методики регистрации и импульсной рентгенографии. Было обнаружено, что характеристики процесса (масса и скорости частиц) зависят от степени чистоты обработки поверхности (шероховатости). Однако по ряду причин результаты исследований были опубликованы значительно позднее [1]. Первые работы, посвященные этой проблеме, были опубликованы в 1970-х гг. Эсеем и др. [2, 3]. Ими была разработана методика непрерывной регистрации скорости фольги, позволившая получить первую количественную информацию о массе частиц [2].

У российских исследователей этот процесс получил название ударно-волнового пыления, у зарубежных – ejection.

В последние годы интерес к этой проблеме возобновился, чему поспособствовало развитие систем диагностики [4-8], численных [9] и молекулярно-динамических методик расчета [10]. На сегодняшний день большинство авторов связывают образование мелкодисперсной фракции

<sup>©</sup> Journal of Dynamics Behavior of Matter. 2017. Vol. 3, Issue 2. P. 321–333.

 $<sup>^{1}</sup>$ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ».

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> СарФТИ НИЯУ «МИФИ».

с развитием неустойчивости Рихтмайера—Мешкова [11, 12], когда ударная волна проходит через возмущенную границу из тяжелого вещества с плотностью  $\rho_{\rm T}$  в легкое с плотностью  $\rho_{\rm T}$ , при этом  $\rho_{\rm T} >> \rho_{\rm T}$ , т. е. число Атвуда равно либо близко к –1. Наличие начальных возмущений на границе может быть связано, например, с механической обработкой поверхности (шероховатость поверхности вследствие обработки на токарном станке, царапины). Также в качестве начальных возмущений границы могут выступать любые неоднородности, сконцентрированные вблизи самой границы тяжелого вещества (поры, включения, границы зерен).

Так как выброс частиц может происходить в различные легкие среды (газ, вакуум), то авторы статьи, как и многие исследователи, работающие в этой области, решают эту задачу путем разделения на две части. Первая — так называемая задача об «источнике» пыления — посвящена определению связи массы, скорости и размеров частиц между собой, с параметрами шероховатости, характеристиками материала (фазовое состояние, плотность, реологические характеристики, поверхностное натяжение) и условиями нагружения (амплитуда, профиль ударной волны). Задача решается при числе Атвуда A = -1, т. е. при выходе ударной волны на границу вещество — вакуум. Вторая задача — о взаимодействии источника пыления с низкоплотными средами (газами), в которой необходимо определить, как характеристики источника (распределение плотности частиц в пространстве, спектр размеров частиц) трансформируются во времени из-за наличия газовой среды.

Как показывают экспериментальные и расчетные исследования, доминирующим фактором, определяющим характеристики источника ударно-волнового пыления, является шероховатость поверхности [4]. Эти возмущения зачастую рассматриваются как периодические, близкие к синусоидальной форме с амплитудой  $a_0$  (половина глубины канавок) и длиной волны  $\lambda$  (расстояние от пика до пика между канавками) [13]. После выхода ударной волны на поверхность возмущения переворачиваются в противофазе, и в дальнейшем из впадин начальных возмущений развиваются струи, впоследствии распадающиеся на множество частиц, а вглубь вещества из вершин распространяются «пузыри» [13]. Как показали расчетно-теоретические исследования, динамика роста пузыря, зависящая от амплитуды  $a_0$ , длины волны  $\lambda$  и скорости свободной поверхности, определяет зависимость количества вещества, выбрасываемого со свободной поверхности, от времени. Натметеberg J. Е. и др. [9] расширили эту теорию и предложили модель, позволяющую рассчитывать количество выброшенной массы вещества от времени, для несинусоидальных возмущений. Это особенно актуально для случаев, когда необходимо рассчитывать выброшенную массу вещества при нагружении свободной поверхности последовательностью ударных волн, так как после прохождения каждой ударной волны форма начальных возмущений меняется.

Модели [9, 10, 13] построены для случая, когда на свободную поверхность вещества выходит стационарная ударная волна. Однако в большинстве экспериментов свободная поверхность металла нагружается нестационарной ударной волной (ударная волна со спадающим профилем давления и скорости за ее фронтом, называемая волной Тейлора). В экспериментах с оловом Zellner M. В. и др. [5, 14] наблюдалось отличие в массе частиц, выброшенных под действием стационарной ударной волны и волны Тейлора, когда олово переходило в жидкую фазу при изоэнтропической разгрузке. Под действием стационарной ударной волны выбрасывалась большая масса вещества, чем под действием нестационарной ударной волны. При этом масса частиц не зависела от амплитуды давления ударной волны. В экспериментах ВНИИЭФ, в которых свободная поверхность свинца нагружалась волной Тейлора, также не наблюдалось существенного влияния амплитуды давления на массу выброшенных частиц [15]. Однако окончательно подтвердить этот факт удалось только в недавних протонографических экспериментах, позволивших получить информацию в более широком диапазоне плотностей, чем при использовании импульсной рентгенографии с мягким спектром [16].

Влиянию профиля ударной волны на источник ударно-волнового пыления посвящено крайне мало расчетно-теоретических работ. Работа [17] анализирует этот вопрос с помощью метода молекулярной динамики. Авторы работы [17] показали, что пространственное распределение плотности и масса выброшенных частиц зависят от формы ударной волны, причем под действием нестационарной ударной волны выбрасывается меньшая масса частиц, чем под действием стационарной ударной волны. При этом амплитуда ударной волны не оказывает влияния на массу частиц, если металл переходит в жидкую фазу. Ранее в [8, 18] авторы статьи получили подобный теоретический вывод, рассмотрев этот процесс с точки зрения механизма развития неустойчивости Рихтмайера — Мешкова для синусоидальных периодических возмущений. В данной работе приведено подробное решение этой задачи и сравнение с результатами экспериментов [5, 14]. Модель позволяет рассчитать пространственное распределение плотности частиц в зависимости от времени, массу выброшенных частиц, а также распределение частиц по размеру в зависимости от начальной амплитуды  $a_0$ , длины волны  $\lambda$ , амплитуды и градиента скорости за фронтом ударной волны.

#### Теоретическое рассмотрение вопроса

Масса выброшенных частиц и пространственное распределение плотности частиц. В работе [13] была рассмотрена задача о выходе стационарной ударной волны на свободную поверхность жидкости, имеющую малые периодические синусоидальные возмущения  $a_0(x) = -a_0 \sin(ky)$  ( $a_0 = A_0/2$  — амплитуда начальных возмущений,  $k = 2\pi/\lambda$  — волновое число,  $\lambda$  — длина волны возмущений). Развитие таких возмущений будет подчиняться решению Рихтмайера [11]:

$$\dot{u}_y = -V_m \cos(ky)e^{kx},$$

$$\dot{u}_x = V_m \sin(ky)e^{kx},$$
(1)

где  $u_y$ ,  $u_x$  — смещение вещества в направлениях y и x;  $k=2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  — длина волны возмущений,  $a_0$  — начальная амплитуда возмущений;  $V_m$  — скорость вершины струи (начальная скорость пузыря) относительно скорости свободной поверхности жидкости. При  $a_0k <<1$   $V_m = a_0kU_{\rm CII}$ , где  $U_{\rm CII}$  — скорость вещества после разгрузки.

Схематично процесс выброса вещества после выхода ударной волны на свободную поверхность среды показан на рис. 1.



Рис. 1. Выброс частиц под действием ударной волны

В работе [13] мы предположили, что скорость роста пузыря уменьшается подобно первоначальному распределению скорости по глубине x (1). Это приводит к уравнению

$$\dot{a}_b \approx -V_m \exp(k(a_b - a_0)),\tag{2}$$

где  $a_b$  – амплитуда пузыря.

Проинтегрировав это уравнение с начальным условием  $a_b(0) = a_0$ , получим закон роста амплитуды пузыря и скорость его роста:

$$a_b(t) = a_0 - \frac{1}{k} \ln(1 + kV_m t),$$

$$V_b(t) = \dot{a}_b(t) = \frac{V_m}{1 + kV_m t}.$$
(3)

В процессе роста возмущений скорость струй остается постоянной и равной  $V_m$ , скорость впадин уменьшается в соответствии с (1), при этом ширина струй также уменьшается. При определении количества выброшенного с поверхности вещества мы воспользовались законом сохранения массы и законами роста струи и пузыря:

$$\begin{cases} a_b(t) = a_0 - \frac{1}{k} \ln(1 + kV_m t), \\ a_s(t) = V_m t - a_0, \\ a_b h_b = a_s h_s, \\ h_b + h_s = \lambda, \end{cases}$$

$$(4)$$

где  $a_s$  – амплитуда струи,  $h_s$  – ширина струи,  $h_b$  – ширина пузыря.

Предположим, что синусоидальная форма возмущений близка к треугольной. Сразу после

переворота возмущений выброшенная масса вещества равна  $m_s = \rho_0 \frac{V}{S} = \rho_0 \frac{1}{2} \frac{a_0 \frac{\lambda}{2} L}{S}$ , где  $\rho_0$  – плотность материала, V – объем,  $S = L\lambda$  – площадь поверхности, L – длина (см. рис. 2 справа),  $\frac{1}{2}a_0\lambda$  – площадь треугольника. Таким образом,  $m_s(t\approx 0) = \rho_0 \frac{a_0}{A}$ .

Предполагается, что при развитии нелинейной стадии форма пузыря близка к треугольной, но амплитуда пузыря  $a_b$  и его ширина  $h_b$  изменяются во времени. Масса вещества, выбрасываемая с единицы площади поверхности, составила

$$m_s(t) = \frac{\rho_0 a_b h_b}{2\lambda} = \frac{\rho_0}{2} \frac{\left(V_m t - a_0\right) \left(\frac{1}{k} \ln\left(1 + kV_m t\right) - a_0\right)}{V_m t + \frac{1}{k} \ln\left(1 + kV_m t\right) - 2a_0}.$$
 (5)

Пренебрегая малыми  $a_0k$  по сравнению с  $V_mt$  и  $\ln(1+kV_mt)$ , получим соотношение для расчета массы выброшенного вещества с поверхности в зависимости от времени в безразмерном виде:

$$m_s(\tau) = \frac{\rho_0}{2k} \frac{\tau \ln(1+\tau)}{\tau + \ln(1+\tau)},\tag{6}$$

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

где  $\tau = kV_m t$ . В выражении (6) время отсчитывается от момента, когда при перевороте возмущений поверхность становится плоской.

При больших  $\tau$  выражение (6) близко к логарифмической зависимости  $m_s(\tau) \approx \frac{\rho_0}{2k} \ln(1+\tau)$ .

По форме эта функция схожа с выражением, полученным в работе [9] из предположения, что пузырь имеет форму параболы и с использованием более точного выражения для скорости роста пузыря, полученного Микаеляном [19, 20].

При определении связи выброшенной массы частиц и их скорости авторы опирались на предположение, что скорость в основании струи (скорость втекания вещества в струю) равна по модулю скорости вершины пузыря (см. рис. 2). Тогда, подставляя второе выражение из уравнений (3) с противоположным знаком в уравнение (6), получим выражение для связи скорости и массы вещества:

$$m_s(\tau) = \frac{\rho_0}{2k} \frac{1}{\left(\frac{V_m}{V_p} - 1\right)^{-1} + \left(\ln\left(\frac{V_m}{V_p}\right)\right)^{-1}}.$$
 (7)

где  $V_p$  – скорость втекания вещества в струю  $(V_p \approx |V_b|)$ .

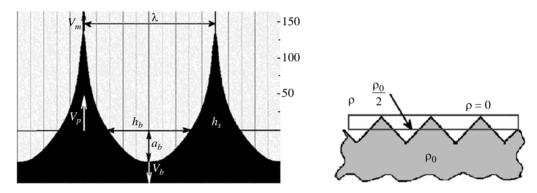


Рис. 2. Форма струи, полученная в численном расчете [13]

Распределение скоростей выбрасываемого вещества в пространстве соответствует автомодельному решению:

$$V_p(x,t) = V_p\left(t - \frac{x}{V_p}\right). \tag{8}$$

В каждый момент времени t скорость частиц, образующихся на невозмущенной поверхности (в основании струй), определяется вторым выражением из системы (3) со знаком «+». Используя автомодельное выражение (8), заменим в выражении (3)  $t-\frac{x}{V_p}$ , чтобы получить пространствен-

ное распределение скорости вдоль струи (между свободной поверхностью и вершиной струи) в любой момент времени *t*:

$$V_p(x,t) = \frac{V_m(1+kx)}{1+kV_mt},\tag{9}$$

где  $x \in [0, x_m]$ ,  $x_m = V_m t$  – положение вершины струи относительно положения невозмущенной поверхности.

В соответствии с выражением (9) скорость вещества вдоль струи линейно зависит от координаты x и уменьшается со временем t. При больших t распределение скорости вдоль струи имеет простой вид  $V_p(x,t) \approx x/t$ . Соотношение (9) в зависимости от безразмерных параметров  $\hat{x} = x/x_m$  ( $\hat{x} \in [0,1]$ ) и  $\tau = kV_m t$  имеет вид

$$V_p(\hat{x},\tau) = V_m \frac{1+\tau \hat{x}}{1+\tau}.$$
 (10)

Подставляя выражение (9) в (7), получим зависимость массы выброшенного вещества, пересекающего координату x, от времени  $m_s(x,t)$ . Учитывая, что плотность среды  $\rho(x,t) = \frac{\partial m_s(x,t)}{\partial x}$ , получим выражение для расчета пространственного распределения плотности на момент времени t. В безразмерном виде функции  $m_s(x,t)$  и  $\rho(x,t)$  имеют вид

$$m_{s}(x,\tau) = \frac{\rho_{0}}{2k} \frac{1}{\left(\frac{\tau(1-\hat{x})}{1+\tau\hat{x}}\right)^{-1} + \left(\ln\left(\frac{\tau+\tau}{1+\tau\hat{x}}\right)\right)^{-1}},$$

$$\rho(x,\tau) = \frac{\rho_{0}}{2(1+\tau\hat{x})^{2}} \frac{\frac{\tau^{2}(1-\hat{x})^{2}}{1+\tau\hat{x}} + (1+\tau)\left[\ln\left(\frac{1+\tau}{1+\tau\hat{x}}\right)\right]^{2}}{\left[\frac{\tau(1-\hat{x})}{1+\tau\hat{x}} + \ln\left(\frac{1+\tau}{1+\tau\hat{x}}\right)\right]^{2}}.$$
(11)

При больших значениях  $\tau$  распределение плотности среды просто обратно пропорционально уменьшается со временем и увеличивается в направлении от вершины струи  $(\hat{x}=1)$  к положению свободной поверхности вещества  $(\hat{x}=0)$ , стремясь к плотности вещества  $\rho_0/2$ :  $\rho(\hat{x},\tau) = \frac{\rho_0}{2(1+\tau\hat{x})}$ . Плотность среды на невозмущенной границе равна  $\rho_0/2$ , так как изначально только половина вещества находилась на этой границе (см. рис. 2).

В работе [13] показано хорошее согласие выражений (6), (7), (11) с результатами численных расчетов; следовательно, их можно использовать для оценки выброшенной массы частиц, распределения плотности вещества в пространстве на любой момент времени при условии, что поверхность нагружается стационарной ударной волной.

**Влияние профиля ударной волны на выброшенную массу вещества.** В работах [5, 14] в серии экспериментов с оловом в области давлений, когда металл находился в твердожидком и жидком состояниях в волне разгрузки, было получено, что масса выброшенных частиц не зависит от амплитуды давления ударной волны, а определяется только формой ударной волны, выходя-

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

щей на свободную поверхность вещества, и параметрами начальных возмущений (амплитуда и длина волны возмущений). Это натолкнуло авторов на необходимость учета влияния профиля ударной волны на пространственное распределение плотности частиц и выброшенную массу вещества, так как в большинстве экспериментов мы имеем дело с нагружением поверхности волной Тейлора. Авторы скорректировали модель (уравнения (6), (7), (10), (11)), базируясь на двух предположениях:

- 1) начальное распределение скоростей вещества при развитии неустойчивости Рихмайера Мешкова зависит от градиента скоростей за фронтом ударной волны;
- 2) средняя плотность образца уменьшается со временем за счет действия растягивающих напряжений, приводящих к фрагментации среды (откольное разрушение жидкого образца).

Взаимодействие нестационарной ударной волны (волны Тейлора) с малыми периодическими синусоидальными возмущениями на поверхности изменит начальное распределение скоростей по глубине вещества (1). Спад давления за фронтом ударной волны приведет к возникновению градиента скоростей в разгруженной жидкости после выхода волны Тейлора на свободную поверхность вещества. Таким образом, при развитии неустойчивости Рихтмайера – Мешкова в металле возникает градиент скоростей, определяемый не только начальными возмущениями поверхности, но и формой ударно-волнового импульса, выходящего на ее свободную поверхность.

Еще одной важной особенностью является то, что после выхода волны Тейлора на свободную поверхность жидкости среда разрушается в глубоких слоях, происходит так называемое откольное разрушение среды за счет действия растягивающих напряжений, а это приводит к уменьшению средней плотности образцов. Предположим, что при разгрузке жидкости происходит мгновенное дробление вещества за счет растягивающих напряжений, т. е. откольная прочность вещества равна нулю. Подобная среда будет разлетаться в соответствии с градиентом скорости, определенным начальным спадом давления и скорости за фронтом ударной волны:

$$\dot{\varepsilon} = 2 \left| \frac{du}{dx} \right| \sim \frac{dP}{dx},\tag{12}$$

где и – массовая скорость вещества за фронтом ударной волны.

В соответствии с законом сохранения массы средняя плотность такой среды, имеющей площадь сечения S, будет уменьшаться за счет увеличения ее длины:

$$\overline{\rho} = \rho_0 \frac{l_0}{l},\tag{13}$$

где  $l_0$ ,  $l_0$  начальная и текущая длина области разлета. С течением времени длина области разлета увеличивается за счет перепада скоростей:

$$l = l_0 + \Delta U t,$$

$$\Delta U = \dot{\varepsilon} l_0.$$
(14)

Подставляя выражения (14) в уравнение (13), получим изменение средней плотности разлетающейся среды:

$$\overline{\rho}(t) = \frac{\rho_0}{1 + \dot{\epsilon}t}.\tag{15}$$

Уравнение (15) для расчета плотности жидкой разрушенной среды можно встретить в монографии Кедринского [21] по исследованию разрушения воды под действием волны Тейлора.

Значение є может быть определено из численных расчетов.

При выбросе частиц со свободной поверхности вещества под действием стационарной ударной волны распределение плотности частиц на любой момент времени при  $\hat{x} \to 0$  (положение невозмущенной границы) должно стремиться к  $\rho_0/2$  – половине плотности вещества, а в случае действия волны Тейлора – к  $\bar{\rho}/2$ , т. е. половине средней плотности разлетающейся среды, которая, в свою очередь, уменьшается со временем по закону (15).

Законы развития малых периодических возмущений на свободной поверхности жидкости под действием ударной волны спадающего профиля также изменяются. Мы скорректировали начальное распределение скоростей после выхода волны Тейлора на свободную поверхность жидкости (1) следующим образом:

$$\dot{u}_y = -V_m \cos(ky) e^{kx},$$

$$\dot{u}_x = V_m \sin(ky) e^{kx} - \dot{\varepsilon}x.$$
(16)

В этом случае уравнение (2), основанное на предположении, что скорость роста пузыря уменьшается подобно первоначальному распределению скорости по глубине *x*, с учетом (16) будет иметь вид

$$\dot{a}_b \approx -V_m \exp(k(a_b - a_0)) - \dot{\epsilon}(a_b - a_0). \tag{17}$$

Уравнение (17) не имеет аналитического решения, кроме  $\dot{\epsilon}=0$  (случай стационарной ударной волны), когда оно переходит в уравнение (3). Из уравнения (17) определяется амплитуда пузыря и скорость его роста  $V_b$ . Как и в случае со стационарной ударной волной, предполагаем, что скорость вещества в основании струи  $V_p$  равна скорости роста углубления  $V_b$ , т. е.  $V_p \approx |V_b|$ . Таким образом, уравнение для определения скорости вещества в основании струи  $V_p$  в размерном и безразмерном видах:

$$V_{p} = V_{m} \exp(kx) + \dot{\varepsilon}x,$$

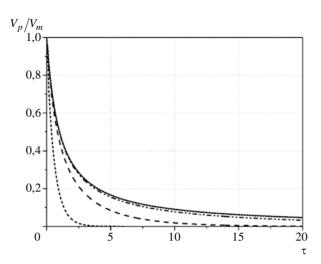
$$\frac{d\phi}{d\tau} = e^{\phi} + \beta\phi,$$
(18)

где  $\varphi = kx$ ,  $\beta = \dot{\epsilon}/kV_m$  — соотношение градиента скоростей в среде, определенного спадом давления и скорости за фронтом ударной волны, волнового числа k и скорости вершины струи.

На рис. 3 показаны зависимости скоростей вещества в основании струи от времени  $V_p(t)$ , отнесенные к скорости фронта частиц  $V_m$ , рассчитанные по уравнению (18) при различных значениях  $\beta$ .

В случае выхода стационарной ударной волны на свободную поверхность вещества процесс выброса частиц не ограничен по времени, так как скорость вещества в основании струи  $V_p(t) \to 0$  при  $t \to \infty$ . При выходе волны Тейлора на свободную поверхность жидкости развитие неустойчивости Рихтмайера – Мешкова прекращается из-за отсутствия втекания вещества в струю. Таким образом, пыление, возникающее под действием волны Тейлора, ограничено по времени и прекращается при достижении скорости  $V_p(t) = 0$ . Время, за которое происходит выброс частиц, определяется из уравнения

$$\frac{d\varphi}{d\tau} = e^{\varphi} + \beta \varphi = 0. \tag{19}$$



На рис. 4 показана зависимость безразмерного времени выброса частиц  $\tau_B$  от соотношения  $\beta$ . Из рисунка видно, что с увеличением соотношения  $\beta$ , в частности при увеличении градиента скоростей  $\dot{\epsilon}$ , время полного выброса частиц уменьшается, а в случае стационарной ударной волны  $(\dot{\epsilon}=0)$  является бесконечным.

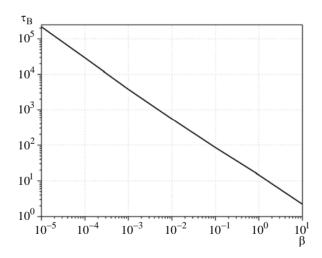


Рис. 4. Зависимость безразмерного времени  $\tau_B$ , за которое происходит выброс частиц, от соотношения  $\beta$ 

Поток вещества через единичную поверхность  $\dot{m}_s(t)$  для случая, когда на свободную поверхность металла выходит стационарная ударная волна, имеет вид

$$\dot{m}_{s}(t) = \frac{\rho(t)V_{p}(t)\xi(t)}{2} = \frac{\rho_{0}V_{m}}{2(kV_{m}t+1)} \frac{(kV_{m}t)^{2} + (kV_{m}t+1)\left[\ln(1+kV_{m}t)\right]^{2}}{\left[kV_{m}t + \ln(1+kV_{m}t)\right]^{2}},$$
(20)

где  $\rho(t) = \rho_0$  — плотность вещества;  $V_p(t) = \frac{V_m}{kV_m t + 1}$  — скорость вещества в основании струи;

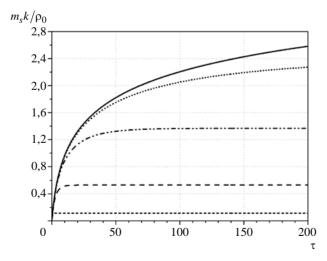
$$\xi(t) = \frac{1}{2} \frac{\left(kV_m t\right)^2 + \left(kV_m t + 1\right) \left[\ln\left(1 + kV_m t\right)\right]^2}{\left[kV_m t + \ln\left(1 + kV_m t\right)\right]^2} -$$
параметр, отвечающий за изменение формы струи.

На основании результатов по влиянию профиля ударной волны на динамику развития неустойчивости Рихтмаера – Мешкова авторами скорректировано уравнение (20) для расчета выброшенной массы вещества под действием волны Тейлора: средняя плотность среды  $\rho(t)$  будет изменяться по закону (15), а скорость вещества в основании струи  $V_p(t)$  в формуле (20) будет определяться уравнением (18). Учитывая эти поправки, массу выброшенных частиц можно рассчитать по системе уравнений, имеющей в безразмерных параметрах следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi}{d\tau} = e^{\varphi} + \beta\varphi, \\ V_{p}(\tau) = V_{m} \frac{d\varphi(\tau)}{d\tau}, \\ m_{s}(\tau) = \frac{\rho_{0}}{2kV_{m}} \int_{0}^{\tau} \frac{V_{p}(\tau)}{(1+\beta\tau)} \frac{\tau^{2} + (\tau+1)\left[\ln(1+\tau)\right]^{2}}{\left[\tau + \ln(1+\tau)\right]^{2}} d\tau. \end{cases}$$

$$(21)$$

Зависимость выброшенной массы частиц от времени  $\tau$  при различных  $\beta$  представлена на рис. 5. Очевидно, что с уменьшение  $\beta$  выброшенная масса частиц увеличивается, так как увеличивается время, затрачиваемое на развитие неустойчивости Рихтмайера — Мешкова. Кроме того, в отличии от случая  $\beta=0$  масса выброшенных частиц имеет конечное значение.



#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Как было показано выше,  $\beta = \dot{\epsilon}/kV_m$ . При малых начальных возмущениях  $a_0k < 1$  и небольших ударно-волновых сжатиях  $\delta \sim 1$  ( $\delta = D/(D-u)$ , D — скорость ударной волны)  $V_m = a_0kU_{\rm CII}$ . Градиент скоростей  $\dot{\epsilon}$  можно представить как  $\dot{\epsilon} \approx \frac{U_{\rm CII}}{\Delta x}$  ( $\Delta x$  — ширина действующего треугольного импульса, рис. 6), тогда можно переписать  $\beta = 1/a_0k^2\Delta x$ . Параметр  $\beta$  оказывается независимым от скорости свободной поверхности вещества, а следовательно, безразмерное время  $\tau_{\rm B}$  и масса выброшенных частиц  $m_s$  также не зависят от скорости свободной поверхности вещества. В области нагружения конденсированной среды, не приводящего к ее сильному разогреву, скорость свободной поверхности вещества равна удвоенной массовой скорости за фронтом ударной волны  $U_{\rm CII} = 2u$  (закон удвоения). Давление на фронте ударной волны взаимно однозначно связано с массовой скоростью u через уравнение состояния вещества; для большинства веществ экспериментальное соотношение имеет вид  $P = \rho_0 \left( C_0 + nu \right) u$ . Таким образом, общая выброшенная масса вещества, отнесенная к плотности  $\rho_0$  и волновому числу k, не зависит от давления на фронте ударной волны, а зависит только от соотношения начальной амплитуды возмущений  $a_0$ , квадрата длины волны  $\lambda^2$  и ширины ударно-волнового импульса  $\Delta x$  (см. рис. 6).

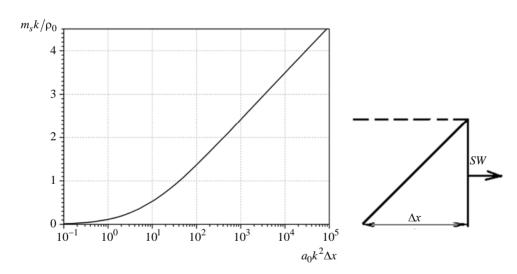


Рис. 6. Зависимость выброшенной массы вещества, отнесенной к плотности  $\rho_0$  и волновому числу k, от соотношения  $a_0 k^2 \Delta x$ 

Учитывая, что распределение скоростей выбрасываемого вещества в пространстве соответствует автомодельному решению, можно рассчитать пространственное распределение плотности выброшенного вещества на любой момент времени по системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{d\varphi}{d\tau} = e\varphi + \beta\varphi, \\ V_{p}(\tau) = V_{m} \frac{d\varphi(\tau)}{d\tau}, \\ m_{s}(\tau) = \frac{\rho_{0}}{2kV_{m}} \int_{0}^{\tau} \frac{V_{p}(\tau)}{(1+\beta\tau)} \frac{\tau^{2} + (\tau+1)\left[\ln(1+\tau)\right]^{2}}{\left[\tau + \ln(1+\tau)\right]^{2}} d\tau, \\ \rho(x,\tau) = \frac{\partial m_{s}(x,\tau)}{\partial x}, \\ x = V_{p}(\tau)(t_{R} - t), \end{cases}$$
(22)

где  $t_R$  — время, на которое необходимо рассчитать пространственное распределение плотности выброшенного вещества.

На рис. 7 представлены пространственные распределения плотности выброшенного вещества, отнесенные к плотности  $\rho_0$ , рассчитанные при  $\beta=0$  (стационарная ударная волна) и  $\beta=0,01$  (значении, наиболее характерном для нагружения поверхности волной Тейлора, созданной с помощью взрывчатого вещества) на разные моменты времени  $\tau$ . На графиках распределение плотности вещества приведено в зависимости от относительной координаты  $\hat{x} = x/(V_m t_R)$  ( $\hat{x} = 1$  – положение вершины струи или фронта частиц,  $\hat{x} = 0$  – положение свободной поверхности вещества).

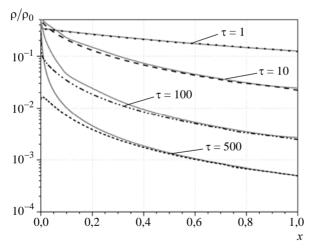


Рис. 7. Пространственное распределение плотности выброшенного вещества на моменты времени т: прямая линия – стационарная ударная волна, пунктир – волна Тейлора

Как видно из рис. 7, пространственные распределения плотности выброшенного вещества при  $\tau < 10$  не отличаются. Это связано с тем, что закон изменения выброшенной массы вещества от времени при  $\beta = 0$  и  $\beta = 0,01$  практически одинаков (см. рис. 5). В дальнейшем проявляется влияние наклона за фронтом ударной волны, которое заметно вблизи свободной поверхности жидкости ( $\hat{x} = 0 - 0,2$ ).

Таким образом, по модели авторов, основанной на механизме развития неустойчивости Рихтмайера – Мешкова, выбрасываемая масса жидкого вещества, пространственное распределение плотности и скоростей выбрасываемого вещества зависят от соотношения  $\beta = \dot{\epsilon}/kV_m$ . Чем больше соотношение  $\beta$  (например, при увеличении градиента скорости за фронтом ударной волны), тем раньше прекращается втекание вещества в струю и, соответственно, меньшее количество вещества выбрасывается с поверхности. Представив параметр  $\beta - 1/a_0k^2\Delta x$ , мы получили взаимно однозначное соответствие между  $m_s k/\rho_0$  и соотношением  $a_0k^2\Delta x$ . Таким образом, по нашей модели получается, что выброшенная масса вещества не зависит от скорости свободной поверхности вещества, а значит, и от давления на фронте ударной волны. Этот вывод справедлив при малых  $a_0k <<1$  и небольших ударно-волновых сжатиях  $\delta \sim 1$ . По-видимому, этот вывод может быть справедлив и при  $a_0k >1$ . Если воспользоваться выводами нелинейной теории развития неустойчивости Рихтмайера – Мешкова, приведенными в [19, 20], скорость  $V_m = \frac{a_0kU_{\rm CII}}{1+a_0k/6}$  при  $\delta \sim 1$ . В этом случае отношение  $m_s k/\rho_0$  будет взаимно однозначно сопоставлено с соотношением  $\frac{a_0k^2\Delta x}{1+a_0k/6}$ .

## Сравнение с результатами экспериментов

В работах [5, 14] представлены результаты исследований влияния условий нагружения и параметров шероховатости на массу частиц, выброшенных со свободной поверхности олова. Результаты получены с использованием рентгенографической и пьезоэлектрической методик. Образцы обрабатывались с шероховатостями Ra16 µin  $(2a_0 \approx 1,6 \text{ мкм}, \lambda \approx 30,5 \text{ мкм})$  и Ra32 µin  $(2a_0 \approx 2,9 \text{ мкм}, \lambda \approx 39,7 \text{ мкм})$ .

Эксперименты проводились в области давлений от 19 до 30 ГПа, что соответствует области фазового перехода из твердого состояния в жидкое для олова при изоэнтропической разгрузке. В опытах [5] исследовался процесс при выходе волны Тейлора на свободную поверхность металла. Волна Тейлора создавалась в оловянном образце с помощью контактного подрыва заряда из состава PBX-9501 диаметром 12,7 мм и высотой 12,7 мм, который инициировался электродетонатором. Амплитуда и градиент давления за фронтом ударной волны варьировались за счет изменения толщины образцов.

В серии экспериментов на легкогазовой пушке образцы из олова нагружались толстыми ударниками, что позволяло создавать в образцах стационарную ударную волну [14]. В подобных экспериментах варьировалась скорость ударников в диапазоне от 1,4 до 1,9 км/с.

Мы сравнили результаты расчетов по (22) с результатами экспериментов. Моделирование экспериментов проводили в два этапа: первый этап – двумерное численное моделирование схемы нагружения, второй – применение численного моделирования для расчета по нашей модели.

В двумерных расчетах определяли амплитуду давления P на фронте ударной волны, спад давления dP/dx за фронтом ударной волны, градиент скорости  $\dot{\varepsilon}$ , скорость свободной поверхности оловянных образцов  $U_{\rm CII}$ . Для олова задавалось уравнение состояния  ${\rm Mu-\Gamma}$ рюнайзена [22, 23], для  ${\rm PBX-9501-JWL}$  [24]. В табл. 1 приведены результаты численных расчетов нагружения свободной поверхности оловянных образцов.

Таблица 1 Результаты двумерных численных расчетов нагружения свободной поверхности оловянных образцов волной Тейлора

h	2	2,5	3	3,5	4	4,5
Р, ГПа	30,5	28,0	26,5	24,3	22,6	21,5
dP/dx, ГПа/см	133,3	106,0	95,0	74,0	61,8	58,0
$U_{ m C\Pi}$ , км/с	2,03	1,91	1,83	1,72	1,63	1,56
$\dot{\epsilon} \cdot 10^5$ , 1/c	5,41	4,57	4,15	3,49	3,2	2,8
$\Delta x$ , cm	0,375	0,417	0,441	0,493	0,509	0,557

Примечание: h — толщина образца; P — давление на фронте ударной волны; dP/dx — градиент давления за фронтом ударной волны;  $U_{\rm CII}$  — скорость свободной поверхности оловянного образца;  $\dot{\epsilon}$  — градиент скорости, определенный спадом давления за фронтом ударной волны;  $\Delta x$  — ширина действующего треугольного импульса.

На рис. 8 представлена зависимость амплитуды давления ударной волны от толщины образца h, оцененная экспериментально. Там же показаны расчетные значения этой величины и профиль волны Тейлора, реализующийся в образце толщиной h=3 мм, рассчитанный в данной работе и в [14].

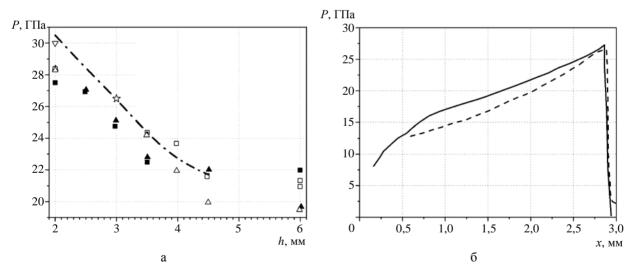


Рис. 8. Зависимость амплитуды давления от толщины образца: а – амплитуда ударной волны; б – расчетный профиль ударной волны в образце толщиной 3 мм. Расчет: - - данная работа, ☆ – [14], ∇ – [25]. Оценка давления [5]: ■ – Ra32 µin, □ – Ra16 µin (по методике PDV после выхода ударной волны на свободную поверхность); ▲ – Ra32 µin, △ – Ra16 µin

Расчетные значения давления на фронте ударной волны несколько выше значений, приведенных в статьях. Авторы работы [5] определяли амплитуду ударной волны по ударной адиабате олова, т. е. через связь скорости свободной поверхности и амплитуды давления на фронте ударной волны. При этом скорость свободной поверхности определялась по резкому увеличению импульса

на поверхности пьезодатчиков, а также измерением зависимости скорости от времени оптогетеродинным датчиком (PDV). Из рис. 8 видно, что расчетные значения амплитуды ударной волны, полученные как в данной работе, так в работе [14], несколько выше, чем оценки давления, сделанные по измерению скорости свободной поверхности образцов. Затухание волны в расчетах несколько слабее, чем по экспериментальным данным. Следовательно, градиент скорости є в расчетах может быть завышен. Однако из рис. 8 видно, что между экспериментальными методиками также существует неопределенность в отношении амплитуды ударной волны, связанная с шероховатостью. В настоящее время оценка амплитуды ударной волны в Лос-Аламосской национальной лаборатории (США) [25] проводится с помощью измерений скорости свободной поверхности полированного участка образца, что гарантирует более точное измерение скорости, не связанное с развитием неустойчивости Рихтмайера – Мешкова и последующего пыления. Неопределенность в измерении скорости свободной поверхности образца также может повлиять на точность оценки выброшенной массы в эксперименте, так как вблизи границы *пыль – образец* плотность довольно быстро меняется (рис. 9).

В табл. 2 приведены результаты расчетов выброшенной массы частиц, рассчитанной по нашей модели двумя способами: 1) при относительной скорости вершины пузыря  $V_m = a_0 k U_{CII}$ :

2) при относительной скорости вершины пузыря 
$$V_m = \left(1 - \frac{U_{\rm CII}}{2D}\right) \left(\frac{a_0 k U_{\rm CII}}{1 + a_0 k/6}\right)$$
.

На рис. 9 сравниваются экспериментальные данные [5, 26] и расчетные значения общей выброшенной массы частиц со свободной поверхности образцов, обработанных с шероховатостью Ra32  $\mu$ in (рис. 9,a) и Ra16  $\mu$ in (рис. 9, $\delta$ ).

Расчетные значения выброшенной массы вещества довольно близки к экспериментальным. Причем лучшее согласие достигается при использовании в модели простого приближения  $V_m = a_0 k U_{\rm CII}$ . Авторы не оценивали массу вещества, выброшенную с поверхности после воздействия волны Тейлора амплитудой P < 21 ГПа, т. е. в области твердой фазы и вблизи границы между твердой и твердожидкой фазой. В этой области давлений влияние на развитие неустойчивости Рихтмайера — Мешкова могут оказывать прочностные свойства вещества.

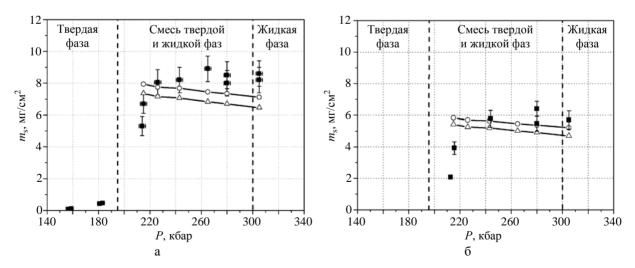


Рис. 9. Сравнение расчетного количества выброшенной массы частиц с экспериментальными значениями, полученными при воздействии волны Тейлора [5, 26]: ■ – эксперимент, О – расчет (вариант 1), △ – расчет (вариант 2)

Таблица 2 Результаты расчетов выброшенной массы частиц после воздействия волны Тейлора

h	2	2,5	3	3,5	4	4,5			
<i>P</i> , ГПа	30,5	28,0	26,5	24,3	22,6	21,5			
dP/dx, ГПа/см	133,3	106,0	95,0	74,0	61,8	58,0			
$U_{\rm C\Pi}$ , км/с	2,03	1,91	1,83	1,72	1,63	1,56			
$\dot{\epsilon} \cdot 10^5$ , 1/c	5,41	4,57	4,15	3,49	3,2	2,8			
t, MKC	9,8	10,5	10,9	11,6	12,3	12,8			
Δх, см	0,375	0,417	0,441	0,493	0,509	0,557			
Ra32 µin $(2a_0 \approx 2,9-3,2 \text{ мкм}, \ \lambda \approx 39,7 \text{ мкм})$									
Р*, ГПа	27,5	27,0	24,8	23,6	22,5	21,7-22,0			
$a_0 k \Delta x$	150,3	167,1	176,7	197,6	204,0	223,2			
$V_m^{(1)}$ , км/с	0,51	0,48	0,46	0,43	0,41	0,39			
$m_s^{(1)}, \text{ MG/cM}^2$	7,12	7,34	7,45	7,68	7,75	7,94			
$\tau^{(1)}$	795,2	795,5	795,6	791,3	796,1	791,3			
$\beta^{(1)} \cdot 10^{-3}$	6,7	6,0	5,7	5,1	4,9	4,5			
$\frac{a_0 k^2 \Delta x}{1 + a_0 k/6}$	144,2	160,3	169,6	189,6	195,7	214,2			
$V_m^{(2)}$ , км/с	0,37	0,35	0,34	0,32	0,31	0,30			
$m_s^{(2)}, \text{ M}\Gamma/\text{cM}^2$	6,46	6,70	6,83	7,07	7,16	7,36			
τ <sup>(2)</sup>	576,9	580,0	588,1	588,9	602,0	608,7			
$\beta^{(2)}\cdot 10^{-3}$	9,2	8,2	7,7	6,9	6,5	5,9			
		Ra16 μin (2 <i>a</i>	$v_0 \approx 1,6-1,85 \text{ M}$	км, λ ≈ 30,5 мкм)					
Р*, ГПа	28,4	26,3	_	24,4	_	21,3-21,6			
$a_0k^2\Delta x$	127,3	141,6	149,7	167,4	172,8	189,1			
$V_m^{(1)}$ , km/c	0,33	0,31	0,30	0,28	0,27	0,26			
$\tau^{(1)}$	669,8	668,7	675,4	670,7	682,4	686,7			
$\beta^{(1)} \cdot 10^{-3}$	7,9	7,1	6,7	6,0	5,8	5,2			
$m_s^{(1)}, \text{ M}\Gamma/\text{cm}^2$	5,21	5,38	5,46	5,64	5,69	5,83			
$\frac{a_0 k^2 \Delta x}{1 + a_0 k/6}$	123,9	137,8	145,7	162,9	168,2	184,0			
$V_m^{(2)}$ , км/с	0,24	0,23	0,22	0,21	0,20	0,20			
$\tau^{(2)}$	487,1	496,1	495,3	503,0	505,5	528,2			
$\beta^{(2)} \cdot 10^{-3}$	10,9	9,6	9,1	8,0	7,8	6,8			
$m_s^{(2)}$ , MG/CM <sup>2</sup>	4,69	4,91	5,01	5,20	5,26	5,42			
		1	1	1		1			

<sup>\*</sup>Давление на фронте ударной волны, оцененное Battler W. Т. и др. по зарегистрированной скорости свободной поверхности образцов в экспериментах [5, 26].

На рис. 10 представлено сравнение расчетной выброшенной массы частиц в зависимости от соотношения скоростей  $V_p + V_{\rm CH}$  и  $V_{\rm CH}$  с экспериментальными данными, полученными в опыте с образцом толщиной 2 мм [5].

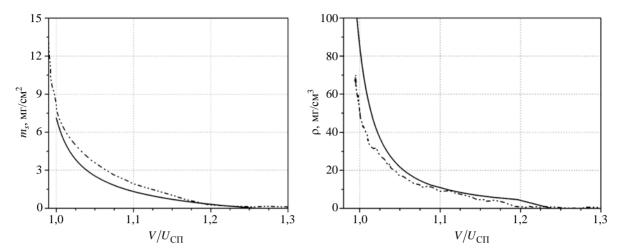


Рис. 10. Сравнение расчетного количества выброшенной массы частиц с экспериментальными значениями, полученными при воздействии волны Тейлора на образец толщиной 2 мм с шероховатостью Ra32 μin [5]: – расчет, — — – эксперимент

Аналогично рассчитаны значения общей выброшенной массы частиц  $m_s$  для случая выхода стационарной ударной волны на образец с шероховатостью Ra32 µin. Согласно модели авторов при выходе стационарной ударной волны на поверхность неустойчивость Рихтмайера – Мешкова развивается неограниченно во времени, а масса выброшенных частиц стремится со временем к бесконечности. В данном случае под расчетной общей массой частиц понимается масса «пыли» до момента удара свободной поверхности образца (или плотной части облака), имеющей скорость  $U_{\mathrm{CII}}^{\mathfrak{I}},$  по пьезодатчику, находящемуся на расстоянии L от начального положения поверхности. В табл. 3 приведены значения этих величин, рассчитанные по модели авторов двумя способами: 1) при относительной скорости вершины пузыря  $V_m = a_0 k U_{\rm CII};$  2) при относительной скорости

вершины пузыря  $V_m = \left(1 - \frac{U_{\text{СП}}}{2D}\right) \frac{a_0 k U_{\text{СП}}}{1 + a_0 k/6}$ . В таблице также приведены экспериментальные дан-

ные по скорости свободной поверхности  $U_{\mathrm{CII}}^{\scriptscriptstyle 9}$  и амплитуде давления на фронте ударной волны, оцененной по скорости свободной поверхности  $P^3$ .

На рис. 11 приведены расчетные и экспериментальные данные по общей выброшенной массе частиц со свободной поверхности оловянных образцов с Ra32 µin под действием стационарной ударной волны [14, 26].

Как и ожидалось, при амплитудах давления ударной волны вблизи состояния полного плавления металла в волне разгрузки расчетные значения общей выброшенной массы частиц хорошо согласуются с экспериментальными. Однако при давлениях на фронте ударной волны P < 24 ГПа расчетные значения лежат выше экспериментальных, что, скорее всего, связано с влиянием реологических свойств металла в области твердожидкого состояния, в частности вязкости. Также это

может быть связано с неопределенностью границы между пылью и образцом, поскольку в данных экспериментах скорость полированного участка поверхности не измерялась.

Таблица 3 Результаты расчетов выброшенной массы частиц после воздействия стационарной волны

<i>P</i> <sup>9</sup> , ГПа	20,5	21,5	23,5	26	26,8			
$U_{\mathrm{C}\Pi}^{\mathfrak{I}}$ , км/с	1,538	1,585	1,676	1,87	1,905			
$V_m^{(1)}, \text{ KM/c}$	0,39	0,40	0,42	0,47	0,48			
$V_m^{(2)}, \text{ km/c}$	0,30	0,30	0,32	0,35	0,35			
$m_{ m A}$ , мг/см $^2$								
L = 13  mm	14,2 <sup>(1)</sup> /13,6 <sup>(2)</sup>							
L = 17  MM	14,9 <sup>(1)</sup> /14,2 <sup>(2)</sup>							
L = 19  mm	15,1 <sup>(1)</sup> /14,5 <sup>(2)</sup>							

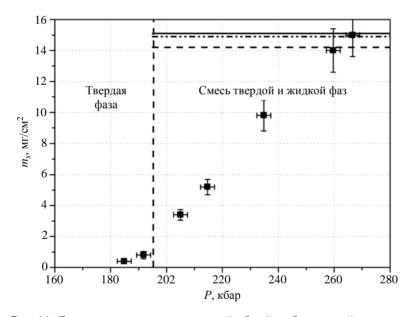


Рис. 11. Сравнение расчетных значений общей выброшенной массы частиц с экспериментальными данными, полученными при воздействии стационарной ударной волны [14]:  $\blacksquare$  – эксперимент, ----L=13 мм, ------L=19 мм

# О спектре размеров частиц

В данной работе приведено решение задачи о влиянии профиля ударной волны на пространственно-временное распределение скорости, плотности и массы выброшенных частиц с поверхности вещества. Модель авторов, построенная на основе механизма развития неустойчивости

Рихтмайера – Мешкова, указывает на то, что в жидком состоянии амплитуда ударной волны не оказывает влияния на выброшенную массу вещества, а определяется соотношением начальной амплитуды  $a_0$ , волнового числа k и градиента скорости за фронтом ударной волны. Модель построена для веществ, находящихся в жидком фазовом состоянии.

Авторы полагают, что профиль ударной волны также влияет на распределение средних размеров частиц вдоль направления движения облака частиц. В частности, в работе [13] авторы предложили для оценки характерного размера частиц при фрагментации среды использовать энергетический критерий по аналогии с работами Grady D. Е. и Кірр М. Е. [27]. При таком подходе основной реологической характеристикой жидкости считается поверхностное натяжение. При дроблении жидкости с поверхностным натяжением характерный (средний) размер частиц  $\overline{d}$  определяется из равенства внутренней кинетической энергии фрагмента и работы, затрачиваемой на образование новых поверхностей:

$$\overline{d} = \alpha_3 \sqrt{\frac{32\sigma}{\rho_0 \dot{\varepsilon}_i^2}},\tag{23}$$

где  $\rho_0$  – плотность вещества;  $\sigma$  – поверхностное натяжение жидкости;  $\dot{\epsilon}_i$  – скорость деформации, реализуемая во фрагменте при дроблении;  $\alpha$  – безразмерная константа.

При нагружении стационарной ударной волной скорость деформации  $\dot{\varepsilon}_i$  однородна вдоль струи и изменяется обратно пропорционально времени, так как скорость вещества вдоль струи  $V_p(x,t)$  линейно зависит от x по уравнению (9):

$$\dot{\varepsilon}_i = \frac{\partial V_p(x,t)}{\partial x} = \frac{V_m k}{1 + k V_m t}.$$
(24)

В модели [13] авторы предполагали, что начало разрушения происходит в момент t=0, приводя к образованию минимального среднего размера частиц  $\overline{d}_m = \alpha_3 \frac{32\sigma}{\rho_0 \left(kV_m\right)^2}$ . В дальней-

шем за счет уменьшения скорости деформации вдоль струи со временем (24) средний размер частиц  $\bar{d}$  будет увеличиваться. Автомодельность течения приведет к распределению среднего размера частиц вдоль облака  $\bar{d}(x,t)$  — средний размер частиц будет увеличиваться от фронта частиц к свободной поверхности вещества. Видимо, данный подход оправдан, так как в работе Durand O. и Soulard L. [10] недавно на основании молекулярно-динамических расчетов показано, что начало разрушения струи происходит несколько позже, приводя к тому, что минимальный размер  $\bar{d}_m$  оказывается больше, чем предполагает модель авторов данной статьи. Однако в дальнейшем средний размер частиц  $\bar{d}$  будет увеличиваться именно за счет уменьшения скорости деформации вдоль струи со временем.

Представленная в данной статье модель указывает на то, что распределение среднего размера частиц вдоль направления движения облака частиц будет зависеть от параметра  $\beta$ . Это связано с тем, что скорость вдоль струи  $V_p\left(x,t\right)$  будет определяться системой уравнений (22), следо-

вательно, и скорость деформации  $\dot{\epsilon}_i = \frac{\partial V_p\left(x,t\right)}{\partial x}$  будет определяться этими уравнениями. Кроме того, в значениях средних размеров частиц существует разброс, связанный со случайным характером разрушения. Таким образом, для описания спектра размеров частиц требуется совместный учет влияния, оказываемого неустойчивостью Рихтмайера – Мешкова, и случайного характера

дробления. Это авторы попытались учесть в работе [18], дополнив систему уравнений (22) уравнениями для расчета распределения среднего размера частиц  $\bar{d}(x,t)$  и функциями, отвечающими за разброс размеров частиц относительно средних. В дальнейшем авторы планируют сравнить эту модель [18] с экспериментальными результатами, полученными Sorenson D. S. и др. [25] по распределению частиц по размерам в облаке и изменению среднего размера частиц вдоль направления движения облака. В частности, на рис. 12 представлено сравнение экспериментальных данных по среднему размеру частиц как функции скорости, полученных Sorenson D. S. и др. [25], с результатами расчетов, проведенных по формуле (23), учитывая, что скорость деформации  $\dot{\epsilon}_i$ и скорость  $V_n(x,t)$  изменяются в соответствии с системой уравнений (22). Расчетные и экспериментальные данные соответствуют нагружению ударной волной амплитудой 30 ГПа, скорости свободной поверхности образца 2 км/с, градиенту скорости за фронтом ударной волны  $5,41\cdot10^5$  1/c, начальной амплитуде возмущений  $a_0 = 20$  мкм, длине волны возмущений  $\lambda = 140$  мкм. Хорошее согласие между расчетными и экспериментальными результатами достигается, если использовать константу  $\alpha = 3.5$ . Такое совпадение данных экспериментов и расчетов дает надежду на то, что наше предположение (22), (23), касающееся связи между средними размерами частиц  $\bar{d}$  и их скоростями  $V_p$ , верно.

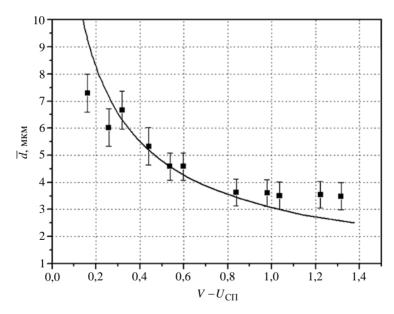


Рис. 12. Средний размер частиц как функция скорости частиц (эксперимент [25] (■) и расчет, полученный с использованием формулы (23) и системы уравнений (22))

#### Заключение

В данной работе приведено решение задачи о влиянии профиля ударной волны на пространственно-временное распределение скорости, плотности и массы выброшенных частиц со свободной поверхности вещества. Модель, построенная на основе механизма развития неустойчивости Рихтмайера — Мешкова, указывает на то, что в жидком состоянии амплитуда ударной волны не оказывает влияния на выброшенную массу вещества, а определяется соотношением начальной амплитуды  $a_0$ , волнового числа k и градиента скорости за фронтом ударной волны. Модель построена для веществ, находящихся в жидком фазовом состоянии.

Сравнение расчетов с экспериментальными данными показало качественное согласие. Основное расхождение количественных данных наблюдается при нагружении поверхности образцов ударной волной, приводящей металл в состояние твердой фазы, либо вблизи границы твердой и твердожидкой фазы. Еще одной причиной отличия результатов, по-видимому, является неопределенность положения границы между пылью и образцом.

## Благодарности

Авторы работы благодарят Панова К. Н. за полезные замечания; Мешкова Е. Е. за проявленный интерес к работе и обсуждение вопросов, касающихся развития неустойчивости Рихтмайера – Мешкова; Лебедеву М. О. за помощь в оформлении статьи.

### Список литературы

- 1. Ogorodnikov V. A., Ivanov A. G., Mikhaylov A. L. et al. On ejecta of particles from free surfaces of metals at shock wave arrival to it, and methods of their diagnostics // Phys. Comb. Expl. 1998. Vol. 34, N 6. P. 103–107.
- 2. Asay J. R., Mix L. P., Perry F. C. Ejection of material from shocked surfaces // Appl. Phys. Lett. 1976. Vol. 29, N 5.
- 3. Asay J. R. Thick-plate technique for measuring ejecta from shock surfaces // J. Appl. Phys. 1978. Vol. 49 (12).
- 4. Vogan W. S., Anderson W. W., Grover M. et al. Piezoelectric characterization of ejecta from shocked tin surfaces // J. Appl. Phys. 2005. Vol. 98. P. 113508.
- 5. Zellner M. B., Grover M., Hammerberg J. E. et al. Effects of shock-breakout pressure on ejection of micron-scale material from shocked tin surfaces // J. Appl. Phys. 2007. Vol. 102. P. 013522 [Erratum: Effects of shock-breakout pressure on ejection of material from shocked tin surfaces // J. Appl. Phys. 2008. Vol. 103. P. 109901].
- 6. Yongtao Chen, Haibo Hu, Tiegang Tang et al. Experimental study of ejecta from shock melted lead // J. Appl. Phys. 2012. Vol. 111. P. 053509.
- 7. Огородников В. А., Михайлов А. Л., Бурцев В. В. и др. Регистрация выброса частиц со свободной поверхности ударно-нагруженных образцов теневым способом // ЖЭТФ. 2009. Т. 109. С. 530-535.
- 8. Михайлов А. Л., Огородников В. А., Сасик В. С. и др. Экспериментально-расчетное моделирование процесса выброса частиц с ударно-нагруженной поверхности // ЖЭТФ. 2014. Т. 118. С. 785–797.

- 9. Cherne F. J., Hammerberg J. E., Andrews M. J. et al. On shock driven jetting of liquid from non-sinusoidal surfaces into a vacuum // J. Appl. Phys. 2015. Vol. 118. P. 185901.
- 10. Durand O., Soulard L. Mass-velocity and size-velocity distributions of ejecta cloud from shockloaded tin surface using atomistic simulations // J. Appl. Phys. 2015. P. 165903.
- 11. Richtmyer R. D. Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids # Comm. Pure Appl. Math. 1960. Vol. 13. P. 297–319.
- 12. Мешков Е. Е. Неустойчивость границы раздела двух газов, ускоряемой ударной волной // Изв. АН СССР. Сер. МЖГ. 1969. № 5. С. 151-158.
- 13. Georgievskaya A. B., Raevsky V. A. Estimation of spectral characteristics of particles ejected from the free-surface of metals and liquids under a shock wave effect // AIP Conf. Proc. 2012. Vol. 1426. P. 1007–1010.
- 14. Zellner M. B., Dimonte G., Germann T. C. et al. Influence of shockwave profile on ejecta // Proc. of SCCM-2009. P. 1047–1050.
- 15. Антипов М. В., Георгиевская А. Б., Игонин В. В. и др. Расчетное моделирование процесса выброса частиц с ударно-нагруженной поверхности // Тр. XVII Международ. конф. «Харитоновские тематические научные чтения. Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013. С. 666–674.
- 16. Antipov M. V., Arinin V. A., Georgievskaya A. B. et al. Results of experimental and calculation researches of ejection and fragmentation of lead loaded with Taylor wave of amplitudes  $P \sim 32-40$  GPa // J. Dyn. Behav. Mater. 2017. Vol. [DOI: 10.1007/s40870-017-0113-7].
- 17. Jian-Li Shao, Pei Wang, An-Min He. Microjetting from a grooved Al surface under supported and unsupported shocks // J. Appl. Phys. 2014. Vol. 116. P. 073501.
- 18. Георгиевская А. Б., Раевский В. А. Влияние профиля ударной волны на распределение размеров частиц, выброшенных со свободной поверхности металлов под действием ударной волны (расчетно-теоретические исследования) // Тр. XVII Международ. конф. «Харитоновские тематические научные чтения. Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015. С. 709—716.
- 19. Mikaelian K. O. Analytical approach to nonlinear Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov instabilities // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 80. P. 508–511.
- 20. Buttler W. T., Oro D. M., Preston D. L. et al. Unstable Richtmyer-Meshkov growth of solid and liquid metals in vacuum // J. Fluid Mech. 2012. Vol. 703. P. 60–84.
- 21. Кедринский В. К. Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
- 22. Mie G. Zur kinetischen theorie der einatomigen korper // Ann. Phys. (Berlin, Ger.) 1903. Vol. 316. P. 657–697.
- 23. Gruneisen G. Theorie des festen zustandes einatomiger elemente // Ann. Phys. (Berlin, Ger.) 1912. Vol. 344. P. 257–306.

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

- 24. LLNL Explosives Handbook. Dobratz B.M & Crawford P.C. UCRL-52997 Rev. 2. January 1985.
- 25. Sorenson D. S., Pazuchanics P., Johnson R. P. et al. Ejecta particle-size measurements in vacuum and helium gas using ultraviolet in-line fraunhofer holography. Los Alamos National Laboratory Tech. Rep. No. LA-UR-14-24722, 2014.
- 26. Schwarzkopf J. D., Balachandar S., Buttler W. T. Compressible multiphase flow // Multiphase Flow Handbook. 2<sup>nd</sup> ed. Boca Raton, FL: CRC Press, Taylor and Francis Group, 2017.
- 27. Grady D. E., Kipp M. E. Mechanisms of dynamic fragmentation: factors governing fragment size // Mech. of Mater. Vol. 4, N 3-4. P. 311-320.

# A Model of a Source of Shock Wave Metal Ejection Based on Richtmyer-Meshkov Instability Theory

A. B. Georgievskaya, V. A. Raevsky

This paper provides a solution for the problem about effect of a shock wave profile on spacetime distribution of velocity, density and mass of particles ejected from material free surface. It is shown that in liquid phase state of material a shock wave amplitude does not affect the ejected material mass, but is determined by the ratio  $\beta = k^2 a_0 \Delta x$  ( $a_0$  is an initial amplitude of perturbation,  $k = 2\pi/\lambda$  is a wave number,  $\lambda$  is perturbation wave length,  $\Delta x$  is a triangular shock wave pulse width). УДК 533.9:519.6

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 162 171

# Результаты двумерного и трехмерного моделирования ускорения электронов в плазменной кильватерной волне

Н. А. Андреюк, А. И. Голубев, Н. П. Пятаков, Б. П. Якутов

Представлен анализ результатов 3D и 2D численного моделирования ускорения электронов в плазменной кильватерной волне. Моделирование проводилось при помощи релятивистского параллельного кода PLASMA-3P. В качестве мишени была выбрана плазма гелия с плотностью электронов  $2 \cdot 10^{19} \, \text{см}^{-3}$ и длиной 430 мкм. Расчеты проводились для трех значений интенсивности линейно поляризованного лазерного импульса (5· $10^{18}$ ,  $1\cdot10^{19}$  $u \ 2.10^{19} \ Bm/cm^2)$  в двумерной и трехмерной постановках с целью выяснить, существуют ли значимые отличия результатов моделирования. Установлено, что, несмотря на равенство амплитуд продольного ускоряющего поля, профили плотности электронов плазмы и спектры ускоренных частии в 3D и 2D случаях заметно отличаются.

#### Введение

Пучки заряженных частиц с энергией порядка десятков  $\Gamma$ эВ используются для различных научных и медицинских приложений. С целью их получения создаются ускорительные комплексы внушительных размеров. Причем для дальнейшего увеличения энергии ускоряемых частиц приходится использовать все более масштабные установки. Например, по проекту Международного линейного коллайдера (ILC) предполагается, что для получения ускоренных лептонов с энергией 500  $\Gamma$ эВ ускоритель должен иметь длину 40 км. Необходимость столь больших размеров вызвана тем, что существует ограничение сверху на поля, ускоряющие частицы в таких установках. Чтобы не допустить электрического пробоя среды, напряженность электрического поля в ускорителях обычно не превышает  $10^4-10^5$  В/см.

Однако существуют альтернативные методы ускорения частиц в лазерных полях и полях разделения зарядов в плазме, лишенные ограничений, связанных с пробоем среды [1]. Напряженность ускоряющего поля, создаваемого в плазменных ускорителях, достигает значений порядка  $10^9 - 10^{10}\,$  В/см при длине ускорения от нескольких миллиметров до нескольких сантиметров. Рекордной в настоящий момент является энергия 4,2 ГэВ электронов, ускоренных в плазме на длине 9 см лазерным излучением мощностью 300 ТВт [2]. При этом способе ускорения мощный короткий лазерный импульс, распространяясь в докритической плазме, возбуждает волну колебаний электронной плотности, идущую вслед за ним. В результате в плазме генерируются продольные электрические поля, ускоряющие электроны. Так как процесс возбуждения электронной плазменной волны лазерным импульсом в чем-то аналогичен возбуждению кораблем волн на поверхности воды, то их принято называть кильватерными.

В данной работе представлен анализ результатов двух- и трехмерного численного моделирования ускорения электронов в плазменной кильватерной волне. Расчеты были проведены при помощи разработанного во ВНИИЭФ трехмерного параллельного релятивистского кода PLASMA-3P (3D3V), основанного на методе «частиц-в-ячейке». Код PLASMA-3P является дальнейшим развитием двумерного кода PLASMA-2P [3]. Численное моделирование было проведено для различных режимов генерации плазменной кильватерной волны. В качестве мишени была выбрана плазма гелия с плотностью электронов  $2 \cdot 10^{19}$  см<sup>-3</sup> и длиной 430 мкм. Трехмерное моделирование ускорения электронов в такой плазме требует больших вычислительных ресурсов. Обход этой проблемы с помощью двумерного моделирования может привести к неверным результатам, поскольку возможно неправильное описание формирования кильватерной волны. Для поиска существенных отличий результатов моделирования расчеты проводились в двумерной и трехмерной постановках.

# Возбуждение кильватерной волны лазерным импульсом. Основные особенности режима кильватерного ускорения электронов

Кильватерная волна возбуждается в плазме под воздействием ультракороткого мощного (порядка  $10^{18}-10^{20}~{\rm Bt/cm}^2$ ) лазерного излучения или пучка высокоэнергетичных электронов. Она представляет собой череду сгущений и разрежений электронной плотности, следующей за драйвером (лазерным импульсом или электронным сгустком). В данной работе моделируется первый способ генерации кильватерной волны, впервые предложенный в 1979 г. [4].

На рис. 1 схематично изображен первый период плазменной кильватерной волны. Как видно из рисунка, распространяясь в плазме докритической плотности, лазерный импульс вытесняет электроны из области взаимодействия излучения с плазмой за счет действия пондеромоторной силы  $\overrightarrow{F_{\rm p}} \sim -\overrightarrow{\nabla} I$ . Положительно заряженные ионы остаются при этом практически неподвижны.

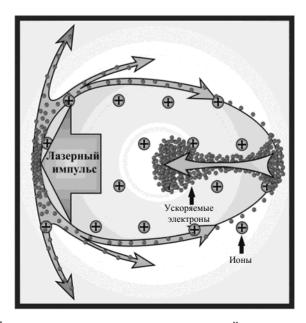


Рис. 1. Схема ускорения электронов в плазменной кильватерной волне

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Таким образом, позади лазерного импульса образуется зона избыточного положительного заряда, которая, в свою очередь, начинает притягивать электроны обратно, вследствие чего в плазме возбуждаются колебания плотности электронов, следующие за лазерным импульсом. Эта плазменная волна, которую называют кильватерной, совершает колебания с плазменной частотой  $\omega_{\rm pl} = \left(4\pi n_{\rm e}e^2/m_{\rm e}\right)^{1/2}$  ( $n_{\rm e}$  — начальная плотность электронов плазмы, e — заряд,  $m_{\rm e}$  — масса электрона) и распространяется с фазовой скоростью, равной групповой скорости лазерного импульса

$$v_{\rm ph} = v_{\rm g} \approx c \sqrt{\left(1 - \omega_{\rm p}^2 / \omega_0^2\right)}. \tag{1}$$

Здесь c — скорость света,  $\omega_0$  — несущая частота лазерного импульса. Вследствие самоинжекции в область избыточного положительного заряда могут попасть фоновые электроны плазмы и под действием продольного ускоряющего поля набрать энергию от сотен до нескольких тысяч МэВ. При этом, находясь в ускоряющей фазе, электроны постоянно набирают скорость, стремясь к скорости света  $v_e \to c$ . Скорость плазменной волны остается постоянной. В результате электроны могут обогнать плазменную волну и перейти в область с тормозящим продольным электрическим полем. Длину участка плазмы, где происходит только ускорение электронов, принято называть длиной дефазировки  $l_{\rm d}$ . Если считать, что электрон в плазменной волне движется со скоростью света, то длина дефазировки равна [5]

$$l_{\rm d} = \frac{\lambda_{\rm pl}}{2(c - v_{\rm ph})} c \approx \frac{\omega_0^2}{\omega_{\rm pl}^2} \lambda_{\rm pl},\tag{2}$$

где  $\lambda_{pl}$  — длина одного периода плазменной волны. Таким образом, максимальное приращение энергии, которое могут набрать электроны, ускоряясь в кильватерной волне, равно

$$\Delta E = qE_{\rm l}l_{\rm d} \approx qE_{\rm l}\frac{\omega_0^2}{\omega_{\rm pl}^2}\lambda_{\rm pl},\tag{3}$$

где q — заряд электрона,  $E_1$  — среднее значение продольного ускоряющего поля. Выражение (3) подходит лишь для приблизительной оценки, поскольку в нем не учитываются нелинейные эффекты, возникающие при кильватерном ускорении, например самофокусировка лазерного импульса. Нелинейные эффекты приводят к изменению амплитуды ускоряющего поля и длины дефазировки.

# Paзличные типы плазменной кильватерной волны. Bubble-режим ускорения

В зависимости от длительности, пространственного профиля и интенсивности лазерного импульса, а также плотности плазмы кильватерная волна может иметь различную форму. Обычно при интенсивности порядка  $10^{17}-10^{18}~{\rm Bt/cm^2}$  и плотности электронов меньше  $10^{19}~{\rm cm^{-3}}$  в плазме возбуждается линейная кильватерная волна: продольное ускоряющее электрическое поле имеет синусоидальную форму, и позади лазерного импульса образуется много периодов плазменной волны с одинаковой амплитудой. При увеличении интенсивности до  $10^{19}~{\rm Bt/cm^2}$  и выше наблюдает-

ся переход в режим генерации нелинейной кильватерной волны. В этом случае амплитуда ускоряющего поля возрастает по сравнению с линейным режимом, приобретает пилообразный характер, но начинает быстро затухать от периода к периоду. В пределе при достаточной интенсивности импульса наблюдается так называемый bubble-режим (или режим «пузыря»), когда в плазменной волне остаются всего одна-две области, практически полностью лишенных фоновых электронов. На рис. 2 показаны полученные при трехмерном численном моделировании картины плотности электронов в нелинейном и bubble-режимах. Лазерное излучение и кильватерная волна распространяются справа налево. Черным цветом обозначены области сгущения электронной плотности, белым – разрежения. На рис. 2, $\alpha$  показан нелинейный профиль кильватерной волны, полученный при интенсивности лазерного импульса  $1\cdot10^{19}$  BT/cm $^2$ , на рис. 2, $\delta$  — профиль волны, характерный для bubble-режима ускорения, при интенсивности лазерного излучения  $2\cdot10^{19}$  BT/cm $^2$ . Начальная плотность электронов плазмы во всех расчетах составляла  $2\cdot10^{19}$  см $^{-3}$ .

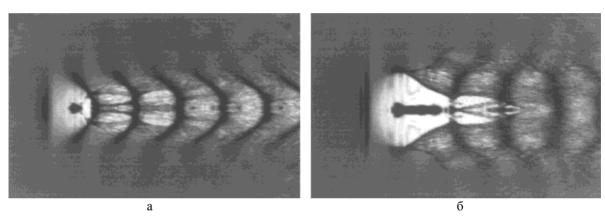


Рис. 2. Распределение плотности электронов в плазменной кильватерной волне, полученное в трехмерных расчетах при различной интенсивности лазерного импульса

На рисунке отчетливо видно, как в область избыточного положительного заряда у ее основания втягиваются фоновые электроны плазмы. Хорошо заметны сгустки ускоряемых электронов. Численное моделирование bubble-режима ускорения впервые было выполнено в  $2002 \, \mathrm{r.}$  [6]. Вскоре тремя группами ученых данный режим был экспериментально независимо подтвержден [7-9]. Одной из главных особенностей данного типа генерации кильватерной волны является возможность получения моноэнергетических пучков ускоренных электронов, так как все электроны ускоряются в одном периоде плазменной волны.

# Постановка задачи и метод расчета

Наиболее распространенным инструментом моделирования процесса ускорения электронов в плазменной кильватерной волне служат PIC-коды (Particle-In-Cell) — математические программы, моделирующие взаимодействие лазерного излучения с бесстолкновительной плазмой путем решения системы уравнений Максвелла — Власова методом «частиц-в-ячейке». Подробное описание основных положений этого метода содержится в [10]. В настоящей работе для численного моделирования лазерно-плазменного ускорения электронов использовался разработанный во ВНИИЭФ релятивистский параллельный трехмерный РІС-код PLASMA-3P. Расчетная область, плазменная мишень и система координат, принятая при моделировании, схематически показаны на рис. 3.

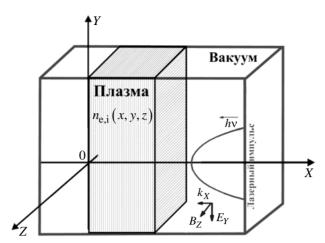


Рис. 3. Расчетная область для численного моделирования лазерно-плазменного ускорения электронов

В качестве мишени была выбрана плазма гелия с плотностью электронов  $2 \cdot 10^{19}~{\rm cm}^{-3}$ и длиной 0,43 мм. По ширине (вдоль осей У и Z) размеры мишени были равны размерам расчетной области – 0,035 мм. Расчеты проводились для трех значений интенсивности линейно поляризованного лазерного импульса:  $5.10^{18}$ ,  $1.10^{19}$  и  $2.10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup> длительностью 12 фс и длиной волны 0,8 мкм. В зависимости от интенсивности лазерного излучения в расчетах были реализованы нелинейный режим LWFA (Laser WakeField Acceleration) и bubble-режим (при интенсивности  $2 \cdot 10^{19}$  BT/см<sup>2</sup>). Расчетная область имела размеры: 0,47 мм вдоль оси X и 0,035 мм по осям Y и Z. Мишень и расчетная область в двумерном случае имели те же размеры по осям X и Y, что и в трехмерном. Мишень моделировалась как двукратно ионизованная плазма гелия. Расчетная сетка в трехмерном расчете состояла из ≈1,069 млрд ячеек, для моделирования плазмы использовалось ≈974,7 млн квазичастиц. В двумерном расчете та же задача моделировалась на сетке из 3,6 млн ячеек с использованием 55,2 млн квазичастиц. Число точек расчетной сетки, приходящееся на плазменную длину волны, что является критерием точности расчета, в обоих случаях было одинаковым – 27 точек. Таким образом, трехмерный расчет требовал большего числа ячеек только за счет геометрии. Время одного расчета в трехмерном случае составляло 5,3 ч, в двумерном − 0,6 ч.

# **Результаты** расчетов. Сравнение энергетических спектров ускоренных электронов

По итогам численного моделирования было проведено сравнение результатов. В качестве основных характеристик рассматривались энергетические спектры электронов, значение продольного ускоряющего поля  $E_x$ , пространственные картины распределения электронов. Было установлено, что профили продольного ускоряющего поля  $E_x$  в кильватерной волне, формирующейся при вхождении излучения в плазму, в трехмерном и двумерном случаях совпадают. На рис. 4 приведен график зависимости ускоряющего поля  $E_x$  от координаты X для интенсивности лазерного импульса  $5\cdot10^{18}$  Вт/см $^2$ . Лазерный импульс успел пройти в плазме  $\approx$ 40 мкм, амплитуда поля  $3\cdot10^9$  В/см.

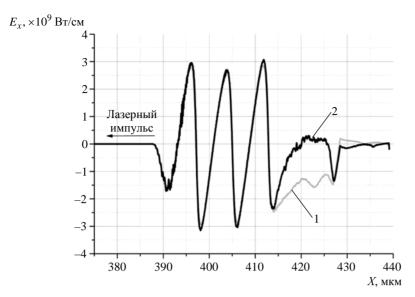


Рис. 4. Зависимость продольного ускоряющего поля от координаты X, полученная в двумерном (1) и трехмерном (2) расчетах на момент времени 174 фс от начала расчета

Из рис. 4 видно, что ускоряющее поле кильватерной волны в начале расчета для двумерного и трехмерного случаев полностью совпадает. Согласно формуле (3) поле  $E_x$  является определяющей характеристикой, влияющей на процесс ускорения электронов при неизменной плотности плазмы и интенсивности лазерного импульса. Следовательно, можно ожидать, что максимальная энергия электронов и их энергетические спектры в двумерных и трехмерных расчетах также будут совпадать, однако этого не происходит, причем различия весьма существенны. Несмотря на то, что вначале в плазме в двумерном и трехмерном случаях формируются идентичные профили кильватерной волны, они эволюционируют по-разному, поэтому через 430 мкм сгустки ускоренных электронов имеют различную энергию. Это происходит из-за того, что области разрежения и сгущения плазмы, из которых состоит кильватерная волна, являются существенно трехмерными структурами и двумерного описания ускорения электронов становится недостаточно. Наиболее хорошо это заметно в случае с максимальной интенсивностью  $2 \cdot 10^{19}$  Вт/см $^2$ , когда реализуется bubble-режим ускорения. На рис. 5 показаны картины плотности электронов данного режима для двумерного и трехмерного расчетов в моменты времени, когда лазерный импульс прошел в плазме 60 и 380 мкм.

Из рис. 5 хорошо видно, что в обоих случаях в плазме формируется одинаковая волна, но к концу двумерного расчета пузырь имеет длину в 1,5 раза меньше, чем в трехмерном расчете, и его структура начинает распадаться. В трехмерном случае пучок электронов имеет форму стержня, характерную для bubble-режима: при достаточной длине ускорения электроны группируются, формируя моноэнергетический пучок. В двумерном расчете хорошо видны два пучка электронов: один – ускорявшийся с начала инжекции электронов в пузырь и теперь находящийся в области дефазировки, второй – в основании пузыря, только вступающий в процесс ускорения.

Наибольшие различия в спектрах ускоренных электронов наблюдаются при интенсивностях  $5\cdot 10^{18}\,$  и  $2\cdot 10^{19}\,$  Вт/см $^2$ . Сравнение этих спектров для двумерного и трехмерного расчетов приведены на рис. 6 и 7.

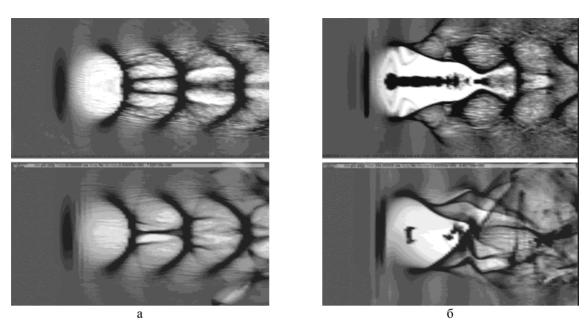


Рис. 5. Распределение плотности электронов в плазменной кильватерной волне, полученное в двумерном (внизу) и трехмерном (вверху) расчетах в bubble-режиме: а — начало расчета ( $\approx$ 60 мкм), б — конец расчета (380 мкм)

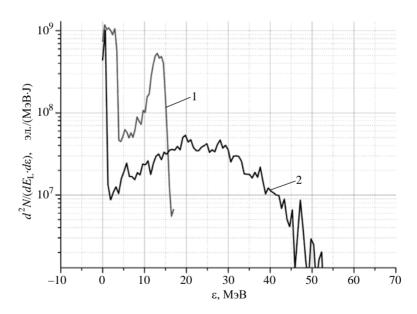


Рис. 6. Спектр электронов, ускоренных в расчете с интенсивностью лазерного импульса  $5\cdot10^{18}~{\rm Br/cm}^2$  и вылетевших в угол  $10^\circ$ : 1- двумерный расчет, 2- трехмерный расчет

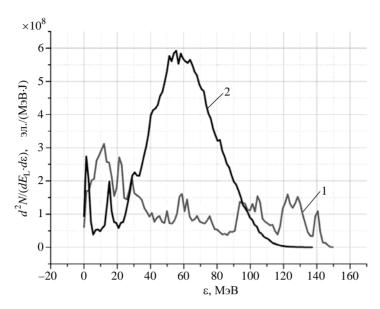


Рис. 7. Спектр электронов, ускоренных в расчете с интенсивностью лазерного импульса  $2 \cdot 10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup> (bubble-режим) и вылетевших в угол  $10^{\circ}$ : 1 – двумерный расчет, 2 – трехмерный расчет

Из рисунков видно, что при интенсивности  $5 \cdot 10^{18}$  Вт/см $^2$  в трехмерном расчете спектр электронов вытянут имеет отсечку на энергии 50 МэВ и много пиков. Это соответствует последовательности ускоренных пучков электронов, так как в этом случае кильватерная волна имеет много периодов, ускоряющих электроны. При интенсивности  $2 \cdot 10^{19}$  Вт/см $^2$  в bubble-режиме спектр трехмерного расчета хорошо демонстрирует особенности данного типа кильватерной волны: он имеет максимум при энергии 60 МэВ и ширину около 80 МэВ по основанию, что соответствует пучку электронов в форме стержня, ускоряющемуся в одном периоде.

Двумерные спектры в обоих случаях полностью отличаются от трехмерного расчета, что доказывает недостаточность двумерного описания.

#### Заключение

При помощи разработанного во ВНИИЭФ параллельного полностью релятивистского кода PLASMA-3P (3D3V), основанного на методе «частиц-в-ячейке», проведено двумерное и трехмерное численное моделирование ускорения электронов в нелинейном и bubble-режимах возбуждения плазменной кильватерной волны с целью обнаружить значимые отличия результатов моделирования. Расчеты проводились для интенсивностей лазерного излучения  $5 \cdot 10^{18}$ ,  $1 \cdot 10^{19}$  и  $2 \cdot 10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup> и начальной плотности электронов плазмы  $2 \cdot 10^{19}$  см<sup>-3</sup>, длина плазмы составляла 430 мкм.

Показано, что несмотря на начальное формирование идентичных профилей кильватерной волны в плазме в двумерном и трехмерном случаях, их эволюция протекает по-разному и через 430 мкм сгустки ускоренных электронов имеют различную энергию. Это объясняется тем, что области разрежения и сгущения плазмы, из которых состоит кильватерная волна, являются существенно трехмерными структурами, поэтому двумерного описания ускорения электронов стано-

вится недостаточно. Наиболее хорошо это заметно в случае с максимальной интенсивностью  $2 \cdot 10^{19}~{\rm BT/cm}^2$ , когда реализуется bubble-режим ускорения. В этом случае в трехмерном расчете спектр электронов имеет максимум при энергии 60 МэВ и ширину около 80 МэВ по основанию, что соответствует пучку электронов, имеющему форму стержня, ускоряющемуся в одном периоде. В двумерном расчете плазменная структура пузыря разрушается к концу расчета и спектр вылетевших частиц полностью отличаются от трехмерного случая. В целом спектры, полученные в двумерных расчетах, плохо отражают особенности соответствующих режимов генерации плазменной волны, поэтому можно сделать вывод, что двумерное описание процесса ускорения электронов в кильватерной волне является недостаточным.

## Список литературы

- 1. Костюков И. Ю., Пухов А. М. Плазменные методы ускорения электронов: современное состояние и перспективы // УФН. 2015. Т. 185, № 1. С. 89–96.
- 2. Leemans W. P., Gonsalves A. J., Mao H. S. et al. Multi-GeV electron beams from capillary-guided subpetawatt laser pulses in the self-trapping regime // Phys. Rev. Lett. 2014. Vol. 113. P. 245002.
- 3. Голубев А. И., Сысоева Т. Г., Якутов Б. П. Генерация ионов в тонких мишенях лазерными импульсами круговой поляризации // Труды XII Международ. конф. «Харитоновские тематические научные чтения. Проблемы физики высоких плотностей энергии». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2010. С. 369—374.
- 4. Tajima T., Dawson J. M. Laser Electron Accelerator // Phys. Rev. Lett. 1979. Vol. 43, N 4. P. 267–270.
- 5. Андреев Н. Е., Горбунов Л. М. Лазерно-плазменное ускорение электронов // УФН. 1999. Т. 169, № 1. С. 53-58.
- 6. Pukhov A., Meyer-ter-Vehn J. Laser wake field acceleration: the highly non-linear broken-wave regime // Appl. Phys. 2002. Vol. 74. P. 355.
- 7. Faure J., Glinec Y., Pukhov A. et al. A laser-plasma accelerator producing monoenergetic electron beams // Nature. 2004. Vol. 431. P. 541.
- 8. Geddes C. G. R., Toth Cs., van Tilborg J. et al. High quality electon beams from a laser wakefield accelerator using plasma-channel guiding // Ibid. P. 538.
- 9. Mangles S. P. D., Murphy C. D. Monoenergetic beams of relativistic electrons from intense laser plasma interactions // Ibid. P. 535.
- 10. Березин Ю. А., Вшивков В. А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука, 1980.

# The Results of 2D and 3D Particle-in-Cell Simulations of Electron Acceleration in Plasma Wakefield

N. A. Andreyuk, A. I. Golubev, N. P. Pyatakov, B. P. Yakutov

The analysis of 3D and 2D particle-in-cell simulations of laser plasma wakefield accelerations is present. Simulations were carried out in the relativistic parallel PIC-code PLASMA-3P. The target consisted of helium plasma with density  $2 \cdot 10^{19}$  cm<sup>-3</sup> and length 430  $\mu$ m. Two- and three-dimensional simulations were carried out for three intensity  $5 \cdot 10^{18}$ ,  $1 \cdot 10^{19}$  and  $2 \cdot 10^{19}$  W/cm<sup>2</sup> of the linearly polarized laser pulse in order to find out whether there are any differences in the results between 2D and 3D cases. It was found out that despite the equality of longitudinal acceleration field's peak values, electron density profiles and spectra of accelerated particles in 3D and 2D simulations distinguish from each other.

УДК 536.715

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 172 187

# Расчет характеристик изотермического и ударно-волнового сжатия энергетических материалов методом молекулярной динамики

Е. В. Гусарова, А. А. Селезенев,В. Ю. Королев

Проведено молекулярно-динамическое моделирование изотермического и ударно-волнового сжатия монокристаллов НМХ, PETN, CL-20 в широком диапазоне параметров, в том числе труднодостижимых в условиях эксперимента. Рассчитаны коэффициент диффузии и вязкость PETN в жидком агрегатном состоянии при различных температурах и давлениях. Расчеты проведены в молекулярно-динамическом коде LAMMPS с использованием модифицированной версии реакционного силового поля ReaxFF-lg.

#### Введение

Метод молекулярной динамики – это численный метод, в котором эволюция во времени системы взаимодействующих частиц определяется интегрированием их уравнений движения. Для описания движения атомов или молекул используется классическая или квантовая механика с учетом межатомного силового поля. Термодинамические характеристики вещества рассчитываются усреднением соответствующих параметров по траекториям частиц. Таким образом, необходимые термодинамические характеристики материала вещества могут быть рассчитаны исходя из микроскопических представлений о структуре вещества. Это особенно важно в отношении энергетических материалов (ЭМ), так как детальное описание свойств таких материалов на микроскопическом уровне может выявить фундаментальный механизм инициирования их детонации. Результаты молекулярно-динамического моделирования (при аккуратном использовании метода) имеют достоверность, сопоставимую с экспериментальными данными. Метод молекулярной динамики позволяет также получить информацию о поведении вещества в экстремальных условиях, недостижимых в условиях лабораторного физического эксперимента.

Понимание механизма ударно-волнового сжатия молекулярных кристаллов, из которых состоит большинство ЭМ, очень важно. Из-за сильной сжимаемости, анизотропии и низкого порога для неупругой (пластической) деформации монокристаллы подвергаются различным структурным изменениям под воздействием ударно-волнового сжатия. Эти превращения зависят от интенсивности процесса нагружения материала и включают в себя деформацию, увеличение температуры и появление дефектов в кристаллической решетке.

<sup>©</sup> Боеприпасы XXI век. 2018. № 2.

## 1. Методика проведения молекулярно-динамического моделирования

Расчеты проводились с использованием молекулярно-динамического кода LAMMPS на основе модифицированной версии межатомного силового поля ReaxFF-lg, разработанной с учетом взаимодействия Ван-дер-Ваальса, что позволяет точнее воспроизводить прочностные характеристики ЭМ.

Авторами статьи был разработан методический подход для расчета уравнений состояния:

- 1) создание геометрии молекулы и элементарной ячейки с использованием кода SageMD2 [1] и преобразование геометрии ячейки во входной файл, содержащий начальные координаты каждого атома, в программе VMD 191 win32 cuda [2];
  - 2) ab-initio оптимизация геометрии молекулы (код NWCHEM);
- 3) выбор элементарной ячейки ЭМ путем наложения параметров элементарной ячейки на оптимизированную геометрию монокристалла;
- 4) выбор расчетной суперъячейки с наложением трансляционной симметрии оптимизированной элементарной ячейки до заданной периодики;
- 5) наложение силового поля ReaxFF в NPT-ансамбле с термостатированием при условиях: температура T = 300 K, давление P = 0.05 ГПа на расчетную суперъячейку;
- 6) верификация расчетной суперъячейки наложением силового поля ReaxFF в NVE-ансамбле по плотности, устойчивости химического состава, симметрии молекул в ячейке;
- 7) молекулярно-динамическое моделирование изотермического сжатия ЭМ путем наложения силового поля ReaxFF в NPT-ансамбле;
- 8) молекулярно-динамическое моделирование ударно-волнового сжатия ЭМ путем наложения силового поля ReaxFF в NPhug-ансамбле;
- 9) обработка результатов расчета и получение уравнений состояния энергетических материалов в широком диапазоне параметров.

Молекулярно-динамическое моделирование изотермического сжатия ЭМ осуществлялось в изобарно-изотермических условиях при гидростатическом сжатии. В термостатированной расчетной суперъячейке задавались определенные значения давления и температуры, для них определялись теплофизические и термодинамические свойства исследуемых ЭМ.

Полученные изотермы сжатия ЭМ аппроксимировали уравнением Мурнагана

$$P(V) = \frac{B_0}{B'} \left[ \left( \frac{V}{V_0} \right)^{-B'} - 1 \right] \tag{1}$$

и уравнением Винета

$$P(V) = 3B_0 \left(\frac{V}{V_0}\right)^{-2/3} \left[1 - \left(\frac{V}{V_0}\right)^{1/3}\right] \exp\left\{-\frac{3}{2}(B'-1)\left[\left(\frac{V}{V_0}\right)^{1/3} - 1\right]\right\}$$
(2)

с целью определения параметров изотермической сжимаемости ЭМ. В уравнениях (1) и (2)  $B_0$  – модуль объемного сжатия материала при нормальных климатических условиях, B' – производная по давлению от модуля объемного сжатия при нормальных условиях.

Молекулярно-динамическое моделирование ударно-волнового сжатия ЭМ проводилось с использованием метода Гюгониостата, реализованного в программном пакете LAMMPS. Термодинамические свойства ударно-сжатого вещества рассчитываются из соотношения Рэнкина – Гюгонио, которое в программном коде LAMMPS выглядит как

$$T_{t} - T = \frac{\left(\frac{1}{2}(P + P_{0})(V_{0} - V) + E_{0} - E\right)}{N_{\text{dof}}k_{\text{B}}} = \Delta,$$
(3)

где  $T_t$  и T – ожидаемая и текущая температура; P и  $P_0$  – текущее и начальное давление; E и  $E_0$  – текущая и начальная внутренняя энергия (потенциальная + кинетическая);  $N_{
m dof}$  — число степеней свободы (используется для определения температуры);  $k_{\rm B}$  – постоянная Больцмана;  $\Delta$  – предельное минусовое отклонение текущей температуры от ожидаемой. Когда система приходит в состояние равновесия, параметр  $\Delta$  флуктуирует в районе нуля.

Для удобства полученные ударные адиабаты были пересчитаны в координатах  $D-U_{\rm p}$ . Пересчет осуществлялся по гидродинамическим соотношениям

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_0},\tag{4}$$

$$\delta = \frac{\rho}{\rho_0}, \tag{4}$$

$$U_p = \sqrt{\frac{P(\delta - 1)}{\delta \rho_0}}, \tag{5}$$

$$D = \frac{U_{\rm p}\delta}{\delta - 1},\tag{6}$$

Таблипа 1

где  $\delta$  – степень сжатия монокристаллов ЭМ;  $U_{\rm p},\ D$  – массовая скорость и скорость ударной волны соответственно.

# 2. Обсуждение результатов молекулярно-динамического моделирования свойств энергетических материалов

Проведено молекулярно-динамическое моделирование таких ЭМ, как циклотетраметилентетранитрамина (HMX,  $C_4H_8N_8O_8$ ), тетранитропентаэритрита (PETN,  $C_5H_8N_4O_{12}$ ), гексанитрогексаазаизовюрцитана (HNIW, CL-20,  $C_6H_6N_{12}O_{12}$ ) и некоторых их полиморфных модификаций.

В результате подготовки расчетных суперъячеек были получены параметры элементарных ячеек исследуемых ЭМ (табл. 1).

Параметры элементарной ячейки монокристаллов ЭМ

Параметры - ячейки	PETN		α-HMX		β-НМХ		ε-CL-20		γ-CL-20	
	МД-	Дан-	МД-	Дан-	МД-	Дан-	МД-	Дан-	МД-	Дан-
	расчет	ные [3]	расчет	ные [4]	расчет	ные [4]	расчет	ные [5]	расчет	ные [5]
a, Å	9,14	9,27	14,91	15,14	6,54	6,53	8,84	8,85	13,15	13,23
b, Å	9,10	9,27	23,53	23,89	10,79	11,03	12,57	12,56	8,12	8,17
c, Å	7,06	6,61	5,82	5,91	7,16	7,35	12,79	13,39	13,97	14,87
α, °	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0
β, °	90,0	90,0	90,0	90,0	102,06	102,69	106,92	106,82	109,17	109,17
γ, °	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0
<i>V</i> , Å <sup>3</sup>	587	569	2040	2139	504	517	1422	1424	1489	1519
ρ, г/cм <sup>3</sup> [6]	1,785	1,773	1,92	1,86	1,95	1,91	2,05	2,04	1,95	1,92

Первоначально для верификации силового поля ReaxFF-lg были проведены расчеты характеристик изотермического сжатия  $\alpha$ - и  $\beta$ -модификаций монокристаллов HMX. Молекулярнодинамическое моделирование изотермического сжатия монокристалла  $\alpha$ -HMX было проведено для температур  $T=10,\,300,\,500$  К в интервале давлений от 0,05 до 60 ГПа (рис. 1).

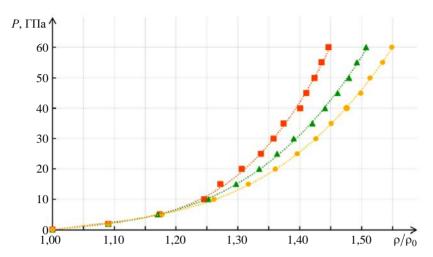


Рис. 1. Зависимость давления от степени изотермического сжатия при различных начальных температурах монокристалла  $\alpha$ -HMX:  $\blacksquare$  – T = 10 K,  $\rho_0$  = 1,992 г/см<sup>3</sup>;  $\blacksquare$  – T = 500 K,  $\rho_0$  = 1,872 г/см<sup>3</sup>

Кроме того, была рассчитана изотерма сжатия  $\beta$ -HMX при температуре 300 К и давлении от 0,05 до 40 ГПа и проведено сравнение изотерм  $\alpha$ - и  $\beta$ -HMX при температуре 300 К (рис. 2). Из рис. 2 видно, что выбранное силовое поле позволяет различать как изотермы разных модификаций кристалла, так и изотермы кристаллов при разной температуре. Все полученные зависимости аппроксимировались полиномиальными уравнениями.

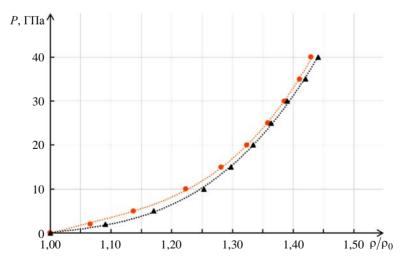


Рис. 2. Зависимость давления от степени изотермического сжатия монокристаллов  $\alpha$ -HMX ( $\blacktriangle$ ,  $\rho_0 = 1,92$  г/см<sup>3</sup>) и β-HMX ( $\blacktriangledown$ ,  $\rho_0 = 1,95$  г/см<sup>3</sup>) при температуре 300 К

Рассчитанная изотерма β-HMX при температуре 300 К сравнивалась с экспериментальными данными [7, 8] и результатами молекулярно-динамического моделирования с использованием квантово-химического расчета из [9]. Поскольку наблюдается хорошее согласие расчетов авторов статьи с имеющимися литературными данными в области низких давлений (рис. 3, см. также цв. вкл.), можно говорить об адекватности выбранной параметризации межмолекулярного силового поля ReaxFF-lg. Экспериментальные данные по определению изотермического сжатия кристалла β-HMX в области высоких давлений отсутствуют. Однако используемый авторами расчетный способ позволяет восстановить изотерму на более высокие интервалы давлений.

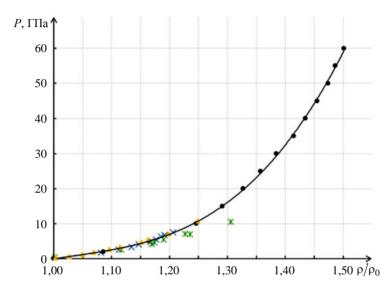


Рис. 3. Зависимость давления от степени изотермического сжатия монокристалла β-HMX при температуре 300 К: • – МД-расчет, данная работа; × – [7]; × – [8]; △ – [9]

Результаты расчета характеристик изотермического сжатия НМХ были аппроксимированы уравнениями Мурнагана (1) и Винета (2). Рассчитаны параметры изотермической сжимаемости  $B_0$  и B', проведено их сравнение с данными [10]: видно, что  $B_0$  и B', рассчитанные из (2), находятся в лучшем согласии с литературными данными, чем рассчитанные из (1) (рис. 4).

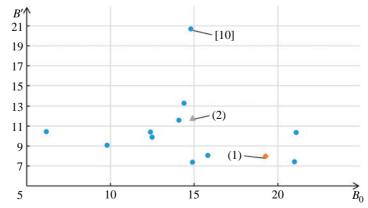


Рис. 4. Сравнение параметров изотермической сжимаемости  $B_0$  и B', рассчитанных в данной работе для  $\beta$ -HMX

Было проведено молекулярно-динамическое моделирование ударно-волнового сжатия монокристаллов  $\alpha$ -HMX при температуре 10 К и давлении от 0,05 до 55 ГПа; при температуре 300 К и давлении от 0,05 до 40 ГПа; при температуре 500 К и давлении от 0,05 до 30 ГПа и  $\beta$ -HMX при температуре 300 К и давлении от 0,05 до 40 ГПа (при бо́льших давлениях кристалл HMX разрушался за счет сильного разогрева). Расчетные ударные адиабаты представлены на рис. 5 и 6 (см. также цв. вкл.). Видно, что ударные адиабаты HMX отличаются как для различных модификаций ( $\alpha$ - и  $\beta$ -) монокристалла HMX, так и для различных начальных температур монокристалла  $\alpha$ -HMX.

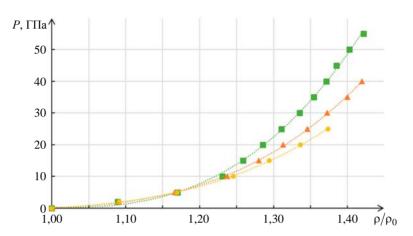


Рис. 5. Зависимость давления от степени ударно-волнового сжатия при различных начальных температурах монокристалла α-HMX: ■ – T = 10 K,  $\rho_0$  = 1,992 г/см<sup>3</sup>; ▲ – T = 300 K,  $\rho_0$  = 1,919 г/см<sup>3</sup>; • – T = 500 K,  $\rho_0$  = 1,872 г/см<sup>3</sup>

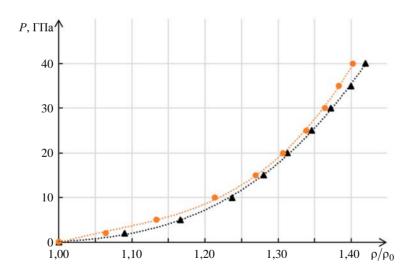


Рис. 6. Зависимость давления от степени ударно-волнового сжатия монокристаллов α-HMX ( $\blacktriangle$ ,  $ρ_0 = 1,92$  г/см<sup>3</sup>) и β-HMX ( $\blacktriangledown$ ,  $ρ_0 = 1,95$  г/см<sup>3</sup>)

Для сравнения результатов моделирования с литературными данными и удобства практического применения ударные адиабаты были пересчитаны в  $D-U_{\rm p}$ -координатах по формулам (4)-(6). На рис. 7 (см. также цв. вкл.) показано сравнение молекулярно-динамического-расчета ударно-

волнового сжатия кристалла  $\beta$ -HMX, выполненного авторами статьи, с данными из [10–13]. Видно хорошее согласие результатов данной работы с указанными источниками. Следовательно, можно утверждать, что параметризация межмолекулярного силового поля ReaxFF-lg для расчета ударно-волновых свойств HMX проведена успешно.

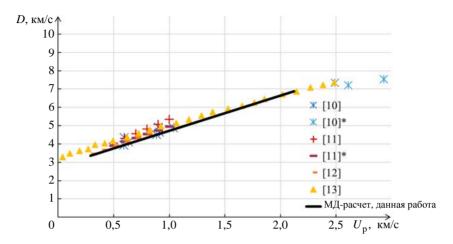


Рис. 7. Зависимость скорости ударной волны от массовой скорости для монокристалла β-HMX при ударно-волновом сжатии: [10], [10]\* – точки экспериментальной ударной адиабаты β-HMX при  $\rho_0 = 1,891$  и 1,900 г/см<sup>3</sup> соответственно; [11], [11]\* – при  $\rho_0 = 1,89$  и 1,903 г/см<sup>3</sup> соответственно

Как и в предыдущих расчетах, изначально для верификации силового поля ReaxFF-lg были проведены расчеты изотермического сжатия ε- и γ-модификаций монокристаллов CL-20. Молекулярно-динамическое моделирование изотермического сжатия обеих модификаций монокристаллов CL-20 проводилось при температуре 300 К в интервале давлений от 0,01 до 40 ГПа. Изотермы показаны на рис. 8. Видно, что силовое поле ReaxFF-lg позволяет фиксировать различия изотерм.

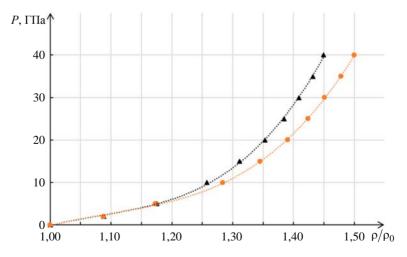


Рис. 8. Зависимость давления от степени сжатия монокристаллов  $\epsilon$  ( $\rho_0 = 2{,}049~\rm г/cm^3$ ) и  $\gamma$  ( $\rho_0 = 1{,}955~\rm r/cm^3$ ) CL-20 при температуре 300 К при изотермическом сжатии

Расчетная изотерма  $\epsilon$ -CL-20 при T=300 К сравнивалась с экспериментальными данными [14]. Наблюдается хорошее согласие расчетов с имеющимися литературными данными в области низких давлений (рис. 9). Таким образом, метод молекулярной динамики позволяет проводить расчеты изотермического сжатия ЭМ в широких областях давлений, в том числе в областях, труднодостижимых в реальном эксперименте.

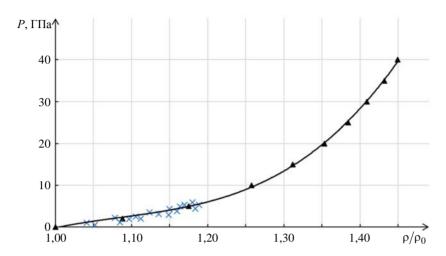


Рис. 9. Зависимость давления от степени изотермического сжатия монокристалла ε-CL-20 при температуре 300 К: ▲ – расчет, данная работа; × – [14]

Результаты расчетов изотермического сжатия CL-20 были аппроксимированы уравнениями (1) и (2). Сравнение расчетных параметров изотермической сжимаемости  $B_0$  и B' для  $\varepsilon$ -CL-20 данной работы с литературными данными из [10] показало их хорошее согласие (рис. 10).

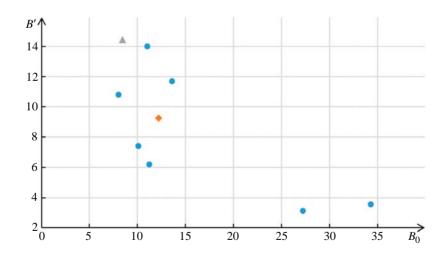


Рис. 10. Параметры изотермической сжимаемости  $B_0$  и B' для  $\varepsilon$ -CL-20, рассчитанные в данной работе и из литературных источников: ● - [10], ◆ - (1), ▲ - (2)

Проведено молекулярно-динамическое моделирование ударно-волнового сжатия монокристаллов  $\epsilon$ - и  $\gamma$ -CL-20 при температуре 300 К и давлениях от 0,01 до 25 ГПа и от 0,01 до 20 ГПа

соответственно (рис. 11). При бо́льших давлениях кристалл CL-20 разрушался из-за сильного разогрева. Как видно из рис. 11, ударные адиабаты полиморфных модификаций CL-20 различны, т. е. метод молекулярной динамики, реализованный с помощью межмолекулярного силового поля ReaxFF-lg, позволяет моделировать и различать свойства ЭМ в различных полиморфных модификациях.

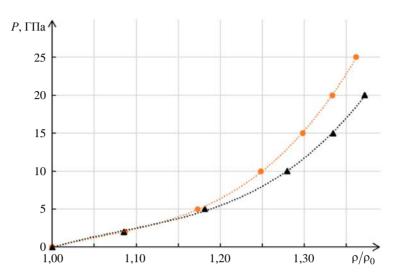


Рис. 11. Зависимость давления от степени сжатия монокристаллов ε-CL-20 ( $\bullet$ ,  $\rho_0$  = 2,05 г/см<sup>3</sup>) и γ-CL-20 ( $\bullet$ ,  $\rho_0$  = 1,96 г/см<sup>3</sup>) при ударно-волновом сжатии

Ударная адиабата  $\epsilon$ -CL-20, полученная в данной работе, сравнивается с расчетными данными [15, 16] (рис. 12). Видно отличное согласие результатов авторов статьи с данными [16] и расхождение ударных адиабат при давлении выше  $\approx$ 5 ГПа с расчетами, выполненными методом DFT-MD [15]. На взгляд авторов статьи, причина расхождения заключается в том, что старые версии метода DTF плохо воспроизводят свойства материала при больших степенях сжатия.

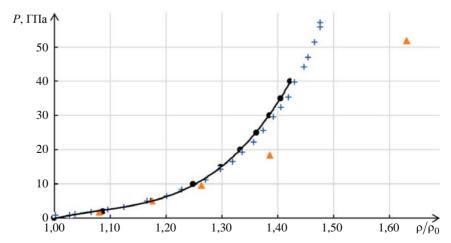


Рис. 12. Зависимость давления от степени сжатия монокристалла ε-CL-20 при ударно-волновом сжатии: ● – данная работа, ▲ – [15], + – [16]

Для сравнения свойств ударно-волнового сжатия полиморфных модификаций монокристалла CL-20 и удобства практического применения результатов моделирования ударные адиабаты были пересчитаны в координатах  $D-U_{\rm p}$  по формулам (4)–(6). Зависимости скорости ударной волны от массовой скорости при ударно-волновом сжатии  $\varepsilon$ - и  $\gamma$ -CL-20 представлены на рис. 13. Видно, что, начиная с массовой скорости  $\approx 0.5$  км/с скорость детонации  $\varepsilon$ -CL-20 возрастает быстрее, чем  $\gamma$ -CL-20.

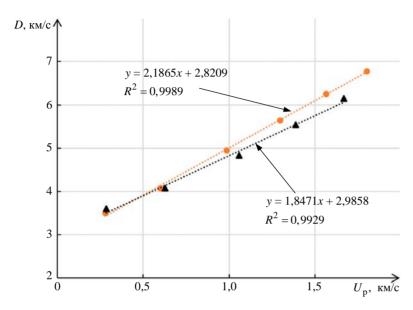


Рис. 13. Зависимость скорости ударной волны от массовой скорости монокристаллов  $\varepsilon$ -CL-20 ( $\bullet$ ,  $\rho_0$  = 2,05 г/см<sup>3</sup>) и  $\gamma$ -CL-20 ( $\blacktriangle$ ,  $\rho_0$  = 1,96 г/см<sup>3</sup>) при ударно-волновом сжатии

Для верификации силового поля ReaxFF были проведены расчеты изотермы ( $T=300~{\rm K}$ ) сжатия монокристалла PETN в интервале давлений от 0,05 до 20 ГПа. Полученная зависимость давления от степени изотермического сжатия сравнивалась с экспериментальными зависимостями из работ [17, 18], а также с результатами молекулярно-динамического моделирования в [19] с использованием реакционного силового поля ReaxFF и его модифицированной версии ReaxFF-lg. На рис. 14 (см. также цв. вкл.) приведены расчетные и экспериментальные давления при различной степени изотермического сжатия монокристалла PETN. Как видно из рисунка, силовое поле ReaxFF-lg позволяет с удовлетворительной точностью восстановить изотерму сжатия кристалла PETN до степени сжатия  $\approx 1,43$ . Отметим, что результаты расчетов авторов статьи лучше согласуются с экспериментальными данными, чем результаты молекулярно-динамического моделирования [19], выполненного с использованием немодифицированного силового поля ReaxFF. Этот факт лишний раз подтверждает обоснованность и правильность выбора авторами данной работы модифицированного силового поля ReaxFF-lg для молекулярно-динамического моделирования свойств ЭМ.

С целью исследования ударных волн и изучения физических и химических изменений под воздействием ударно-волнового сжатия кристалла PETN были проведены расчеты его ударных адиабат при температуре 300 К и давлениях от 0,05 до 30 ГПа и температуре 500 К и давлениях от 0,05 до 20 ГПа. В результате было установлено, что PETN при температуре 500 К и давлении 0,01 ГПа находится в жидкой фазе. Расчетные ударные адиабаты для твердого ( $T=300~{\rm K}$ ) и жидкого ( $T=500~{\rm K}$ ) РЕТN представлены на рис. 15. Как видно из рисунка, ударные адиабаты разных агрегатных состояний РЕТN отличаются.

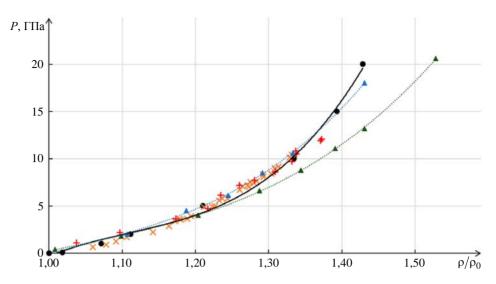


Рис. 14. Зависимость давления от степени изотермического сжатия монокристалла PETN при температуре 300 К: ● – расчет, данная работа;  $\times$  – [17], + – [18];  $\blacktriangle$  – [19], поле ReaxFF-lg;  $\blacktriangle$  – [19], поле ReaxFF

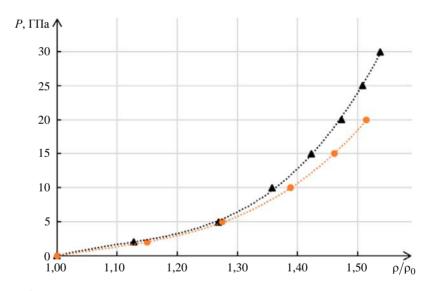


Рис. 15. Зависимость давления от степени сжатия PETN в твердом и жидком состояниях при ударно-волновом сжатии

Для сравнения свойств ударно-волнового сжатия PETN в жидком и твердом агрегатных состояниях их ударные адиабаты были пересчитаны в координатах  $D-U_{\rm p}$  по формулам (4) -(6). Зависимости скорости ударной волны от массовой скорости при ударно-волновом сжатии PETN представлены на рис. 16. Как видно из рисунка, зависимости для твердого и жидкого PETN различны, т. е. метод молекулярной динамики, реализованный с помощью межмолекулярного силового поля ReaxFF-lg, позволяет моделировать и различать свойства ЭМ в различных агрегатных состояниях.

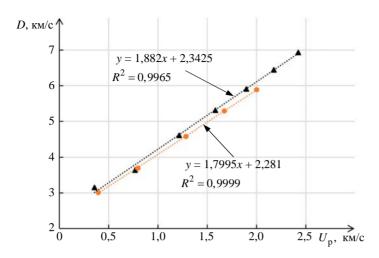


Рис. 16. Зависимость скорости ударной волны от массовой скорости PETN в твердом и жидком состояниях при ударно-волновом сжатии

Расчетные зависимости ударно-волнового сжатия монокристалла РЕТN при  $T=300~\rm K$  сравнивались с экспериментальными данными из [10], с результатами молекулярно-динамического моделирования из [20, 21], а также с DFT-расчетом из [21] (рис. 17, см. также цв. вкл.). Из рис. 17 видно хорошее согласие результатов данной работы с литературными источниками. Следовательно, параметризация межмолекулярного силового поля ReaxFF-lg для расчета ударно-волновых свойств PETN проведена успешно.

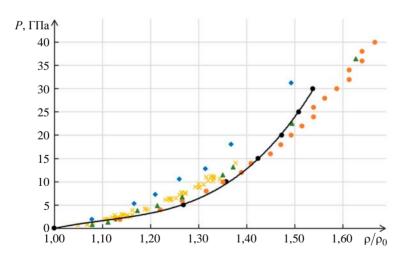


Рис. 17. Зависимость давления от степени сжатия монокристалла PETN при ударно-волновом сжатии: 

• – расчет, данная работа; × – [10]; • – [20]; • – [21], молекулярно-динамическое моделирование с использованием реакционного силового поля ReaxFF; ▲ – [21], DFT-расчет

Все полученные изотермы и ударные адиабаты рассматриваемых энергетических материалов были аппроксимированы полиномиальными уравнениями и представлены в удобной для использования и инкорпорировании в компьютерные гидродинамические коды форме — в виде уравнений, объединенных в сводные таблицы. Также были получены уравнения состояния вышеуказанных ЭМ.

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Следующим этапом работы был расчет вязкости жидкого PETN при различных температурах и давлениях. Сначала была получена зависимость вектора среднего квадрата смещения атомов PETN от времени. По тангенсу угла наклона данной зависимости был рассчитан коэффициент диффузии PETN в жидком агрегатном состоянии по уравнению

$$D = \frac{1}{6} \frac{msd}{t},\tag{7}$$

из которого получена вязкость по уравнению

$$\eta = \frac{kT}{2\pi aD}.$$
(8)

Результаты расчетов приведены в табл. 2 и на рис. 18. Видно, что расчетная вязкость увеличивается с ростом давления и уменьшается с ростом температуры. Это согласуется с физическими представлениями о поведении вязкости органических веществ.

Таблица 2 Зависимость коэффициента диффузии и вязкости PETN в жидком агрегатном состоянии от температуры и давления

T, K	Р, атм.	$D \cdot 10^{14}, \text{ m}^2/\text{c}$	η, Па∙с
	500	2,75	49,9
500	900	1,77	77,6
	1300	0,45	305,1
	500	23,2	7,7
650	900	12,7	14,1
	1300	6,3	28,3
	500	87,3	2,5
800	900	62,7	3,5
	1300	24,4	9,0

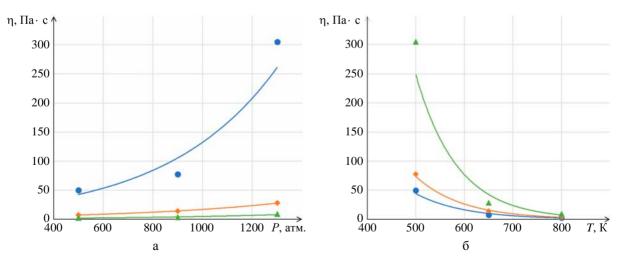


Рис. 18. Зависимость вязкости РЕТN в жидком агрегатном состоянии от давления ( $\bullet$  – T = 500 K, y = 13,79433 $e^{0.00226x}$ ,  $R^2$  = 0,91931;  $\bullet$  – T = 650 K, y = 3,35024 $e^{0.00163x}$ ,  $R^2$  = 0,99810;  $\blacktriangle$  – T = 800 K, y = 1,02406 $e^{0.00159x}$ ,  $R^2$  = 0,92848) (а) и температуры ( $\bullet$  – P = 1300 атм., y = 88191 $e^{-0.012x}$ ,  $R^2$  = 0,9609;  $\bullet$  – P = 900 атм., y = 12837 $e^{-0.01x}$ ,  $R^2$  = 0,9965;  $\blacktriangle$  – P = 1300 атм., y = 6403 $e^{-0.01x}$ ,  $R^2$  = 0,9793) (б)

Исходя из зависимостей логарифма коэффициента диффузии от обратной температуры и логарифма вязкости от обратной температуры рассчитывались энергия активации диффузии и энергия активации в температурной зависимости вязкости и предэкспоненциальные множители для каждого значения давления. Из рис. 19 видно, что энергия активации увеличивается с ростом давления.

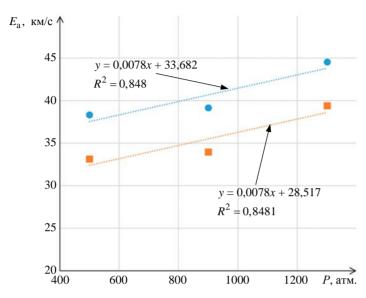


Рис. 19. Зависимость энергии активации диффузии (●) и энергии активации в температурной зависимости вязкости (■) от давления

#### Заключение

Разработан методический подход для определения свойств ЭМ на основе молекулярнодинамического моделирования, а также проведена апробация межмолекулярного силового поля ReaxFF для моделирования свойств монокристаллов ЭМ.

Проведено молекулярно-динамическое моделирование изотермического сжатия монокристаллов следующих ЭМ:  $\alpha$ - и  $\beta$ -HMX, PETN,  $\epsilon$ - и  $\gamma$ -CL-20. Получены зависимости давления от степени сжатия при температуре 300 К в широком интервале давлений, в том числе в диапазоне, труднодостижимом в условиях физического эксперимента. На основании результатов моделирования рассчитаны параметры изотермической сжимаемости  $B_0$  и B' энергетических материалов. Показано, что с использованием силового поля ReaxFF с удовлетворительной точностью можно воспроизвести экспериментальные изотермы сжатия.

Методом Гюгониостата проведено молекулярно-динамическое моделирование ударноволнового сжатия монокристаллов  $\alpha$ - и  $\beta$ -HMX, PETN,  $\epsilon$ - и  $\gamma$ -CL-20. Получены зависимости давления от степени сжатия, пересчитанные в зависимость скорости ударной волны от массовой скорости. Все результаты продемонстрировали хорошее согласие с экспериментальными и ранее полученными расчетными данными.

Показано, что найденная параметризация межмолекулярного силового поля ReaxFF способна воспроизводить изменение свойств ЭМ при расчете различных агрегатных состояний, полиморфных модификаций и начальных температур кристаллов ЭМ.

Рассчитаны коэффициенты диффузии и вязкость PETN в жидком агрегатном состоянии при различных значениях температуры и давления. Рассчитаны энергия активации диффузии и энергия активации в температурной зависимости вязкости жидкого PETN.

#### Список литературы

- 1. Selezenev A. A., Aleynikov A. Y., Gantchuk N. S. et al. SageMD: molecular-dynamic software package to study properties of materials with different models for interatomic interactions // Computational Material Science. 2003. N 28. P. 107–124.
- 2. Theoretical and Computational Biophysics Group [Electronic resource]. http://www.ks.uiuc.edu/Research/ymd/.
- 3. Zhurova E. A., Stash A. J., Tsirelson V. G. et al. Atoms-in-molecules study of intra- and intermolecular bonding in the pentaerythritol tetranitrate crystal // J. Am. Chem. Soc. 2006. Vol. 128, N 45. P. 14728–14734.
- 4. Cady H. H., Larson A. C., Cromer P. T. The crystal structure of  $\alpha$ -HMX and a refinement of the structure of  $\beta$ -HMX // Acta Cryst. 1963. Vol. 16. P. 617–623.
- 5. Nielsen A. T., Chafin A. P., Christian S. L. et al. The crystal structure of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene // Tetrahedron. 1998. Vol. 54. P. 11793.
- 6. Орлова Е. Ю. Химия и технология бризантных взрывчатых веществ. Л.: Химия, 1981.
- 7. Olinger B., Roof B., Cady H. // Proc. of the Int. Symposium on High Dynamic Pressures. C.E.A.: Paris, 1978. P. 3–8.
- 8. Yoo C.-S., Cynn H. Equation of state, phase transition, decomposition of  $\beta$ -HMX (octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine) at high pressures // J. Chem. Phys. 1999. Vol. 111. P. 10229.
- 9. Sewell T. D., Menikoff R., Bedrov D., Smith G. D. A molecular dynamics simulation study of elastic properties of HMX // J. of Chem. Phys. 2003. Vol. 119(14) [DOI: 10.1063/1.1599273].
- 10. Marsh S. P. Last shock Hugoniot data. California: University of California Press, 1980.
- 11. Gibbs T. R. Last explosive property data. London: University of California Press, 1980.
- 12. Bernecker R. R. Observations on the Hugoniot for HMX // AIP Conf. Proc. 1996. Vol. 370. P. 141.
- 13. Goddard W. A., Meiron D. I., Ortiz M. et al. Center for simulation of dynamic responsein materials. Pasadena: California Institute of Technology, 1998.
- 14. Gump J. C., Peiris S. M. Phase stability of  $\varepsilon$ -HNIW (CL-20) at high-pressure and temperature // Proc. of the  $13^{th}$  Int. Detonation Symposium. Norfolk, 2007. P. 1045-1050.
- 15. Wixom R. R., Damm D. L. First-principles prediction of equations of state for molecular crystal explosives. Kiev, 2012. P. 480423.
- 16. Brundage A. L., Wixom R. R., Tappan A. S., Long G. T. Mesoscale simulations of shock initiation in energetic materials characteri-zed by three-dimensional nanotomografy // AIP Conf. Proc. 2009. Vol. 315. P. 1195.
- 17. Olinger B., Halleck P. M., Cady H. H. The isothermal linear and volume compression of pentaerythritol tetranitrate (PETN) to 10 GPa (100 kbar) // J. of Chem. Phys. 1975. Vol. 62. P. 4480–4483. [DOI: 10.1063/1.430355].

- 18. Yoo C. S., Cynn H., Howard W. M., Holmes N. Equations of state of unreacted high explosives at high pressures // 11<sup>th</sup> Int. Detonation Symposium. Colorado, 1998. P. 951–957.
- 19. Liu L., Liu Y., Zybin S. V. et al. ReaxFF-lg: correction of the ReaxFF reactive force field for London dispersion, with applications to the equations of state for energetic materials // J. of Phys. Chem. 2011. Vol. 115, N 1440. P. 11016–11022.
- 20. Jaidann M., Abou-Rachid H., Bouamoul A., Brisson J. Novel approach to make Hugoniot predictions: quantum mechanics molecular dynamics calculations // DRDC-RDDC. 2016. P. 015.
- 21. Shan T. R., Wixom R. R., Mattsson A. E., Thompson A. P. Atomistic simulation of orientation dependence in shock-induced initiation of pentaerythritol tetranitrate // J. of Phys. Chem. 2013. Vol. 117.

## Calculation of the Characteristics of Isothermal and Shock-Wave Compression of Energy Materials by the Method of Molecular Dynamics

E. V. Gusarova, A. A. Selezenev, V. Yu. Korolev

Molecular dynamics simulation of isothermal and shock wave compression of HMX, PETN, Cl-20 single crystals was carried out in a wide range of parameters, including difficult to achieve under experimental conditions. The diffusion coefficient and viscosity of PETN in a liquid aggregate state are calculated at various temperatures and pressures. All calculations were performed in the LAMMPS MD code using a modified version of the ReaxFF-lg reaction force field.

УДК 623.454.242

DOI: 10.53403/9785951504937 188

# Численное моделирование работы слэпперного детонатора на основе малочувствительного взрывчатого вещества

А. В. Скляров, П. А. Устимкин, А. А. Селезенев, С. А. Чевтаев, Н. А. Абрамов Представлены результаты численного моделирования процессов, протекающих при срабатывании детонаторов слэпперного типа. Построена и верифицирована математическая модель процесса нагружения малочувствительного взрывчатого вещества гексанитростильбена импульсом короткой длительности. Определены условия инициирования гексанитростильбена. Верифицирована модель метания ударника, формируемого продуктами детонации взрывчатого вещества. Сделаны выводы о влиянии конструктивных особенностей детонатора и физических свойств материала пластины-ударника на скорость ее метания.

#### Введение

В настоящее время является актуальной задача создания боеприпасов нового поколения, которые должны обладать повышенной стойкостью к внешним воздействиям и поражающим факторам [1]. Для ее решения ведутся разработки новых типов энергетических материалов, требующих, в свою очередь, создания новых средств инициирования. Долгое время в качестве инициирующих устройств применялись детонаторы, использующие энергию взрывающейся тонкой проволоки. Предполагается, что боеголовки нового поколения самонаводящихся, адаптивных и высокоскоростных проникающих снарядов должны иметь усовершенствованные системы одноточечного и многоточечного инициирования на основе слэпперных детонаторов (англ. exploding foil initiator – EFI) [2]. Слэпперный детонатор (рис. 1) обладает набором характеристик, которые позволяют ему считаться одним из наиболее безопасных: высокой стойкостью к пулеосколочному воздействию, стойкостью к внешним токам наводки, отсутствием контакта между взрывчатым веществом (ВВ) и токопроводящим мостиком.

#### 1. Физическая модель функционирования слэпперного детонатора

Слэпперный детонатор (см. рис. 1) [3] состоит из колпачка 1, шашки промежуточного заряда взрывчатого вещества 2, запрессованного в металлическую втулку 3. К металлической втулке прилегает слой из пленки-изолятора 4, разделяющей инициирующее устройство и инициируемое ВВ. Инициирующее устройство состоит из поликоровой подложки 8, тонкого металлического мостика 7, укрывающей мостик полимерной пленки 6 и диафрагмы 5.

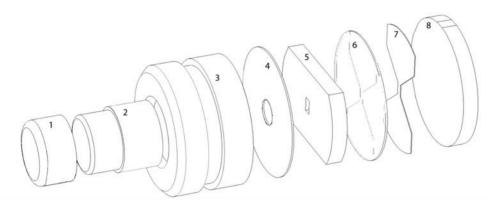


Рис. 1. Слэпперный детонатор: 1 – колпачок, 2 – навеска BB, 3 – втулка, 4 – полимерная изоляция, 5 – диафрагма, 6 – полимерная пленка, 7 – мостик, 8 – подложка

При прохождении электрического тока по мостику происходит взрывное испарение металла, в результате чего формируется импульс давления, выдавливающий полимерную пленку 6 в окно диафрагмы 5 инициирующего устройства. Метаемый таким способом слэппер разгоняется в канале диафрагмы под действием расширяющихся продуктов испарения мостика и к моменту соприкосновения с BB достигает скорости около 4 км/с. При ударе слэппера о заряд BB реализуется импульс высокого давления и малой длительности, вызывающий детонацию последнего. Образующиеся в результате детонации BB продукты взрыва расширяются и формируют из металлического колпачка 1 ударник, предназначенный для инициирования основного заряда BB.

Для снаряжения слэпперных детонаторов применяется взрывчатое вещество пониженной чувствительности гексанитростильбен (ГНС). Детонаторы, снаряженные ГНС, сохраняют работоспособность при действии ударных нагрузок высокой интенсивности, возникающих, в частности, при пулеосколочном воздействии на боеприпасы. Прогнозирование и исключение возможных нестабильностей в работе с применением расчетно-теоретических методов на этапе проектирования позволит сократить количество проводимых опытов.

Для математического моделирования процесс работы слэпперного детонатора может быть разделен на три этапа: взрывное испарение электрического проводника и метание слэппера, инициирование детонации малочувствительного BB слэппером, метание колпачка ударника продуктами взрыва.

#### 2. Инициирование детонации гексанитростильбена

Рассмотрим процесс инициирования детонации малочувствительного ВВ гексанитростильбена. В рамках разрабатываемой модели решаются три задачи: константное обеспечение уравнений состояния (УРС) используемых материалов, построение расчетной модели ударно-волнового

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

нагружения и определение критических параметров инициирования ГНС с помощью методов математического моделирования.

Для определения параметров состояния материала при его ударно-волновом сжатии можно использовать УРС в форме Ми – Грюнайзена [4]

$$P(\rho,T) = P_{v}(\rho) + \gamma \rho E_{T}(T), \tag{1}$$

$$E(\rho,T) = E_{v}(\rho) + E_{T}(T), \tag{2}$$

где  $\rho$ , T — плотность и температура материала; P, E — давление и удельная внутренняя энергия;  $P_{\rm y}$ ,  $E_{\rm y}$  — упругая составляющая давления и внутренней энергии;  $E_{\rm T}$  — тепловая составляющая внутренней энергии;  $\gamma$  — коэффициент Грюнайзена.

Уравнения (1) и (2) совместно с уравнениями сохранения на ударном скачке могут быть разрешены относительно давления на фронте ударной волны  $P_{\Gamma}$  [4]:

$$P_{\Gamma} = \frac{\rho_0 C_0^2}{n} \frac{\left[ \left( h - \frac{n+1}{n-1} \right) \sigma^n + \frac{2n\sigma}{n-1} - (h+1) \right]}{h - \sigma},$$
(3)

где  $C_0$  – скорость звука в материале, n – показатель степени в уравнении Мурнагана для упругого

давления, 
$$\rho_0$$
 — начальная плотность материала,  $\sigma = \frac{V_0}{V}$ ,  $E_y = \int\limits_V^{V_0} P_y dV$ ,  $V = \frac{1}{\rho}$ ,  $h = 1 + 2/\gamma$ .

Приведенные соотношения позволяют полностью определить УРС  $\mathrm{Mu}$  – Грюнайзена путем подбора параметров n и h с целью установления максимального соответствия опытным данным по ударно-волновому сжатию. В соответствии с изложенным подходом были подобраны параметры для определения свойств твердой фазы ГНС и слэппера из полиимид-фторопластовой пленки. Ударные адиабаты материалов были получены на основе молекулярно-динамических расчетов и экспериментальных данных [5]. Плотность материалов при нормальных условиях, показатель степени в уравнении Мурнагана и коэффициент Грюнайзена приведены в табл. 1.

Таблица 1 Параметры УРС материалов, задействованных в инициировании ГНС

Материал	ρ <sub>0</sub> , г/см <sup>3</sup>	n	γ
Кристаллический ГНС	1,745	4,7	1,4
Пористый ГНС	1,600	8,7	1,7
Полиимид	1,414	3,5	1,5
Фторопласт	2,204	5,7	1,2

Для подтверждения корректности выстраиваемой математической модели использовались, в частности, результаты экспериментов по ударно-волновому нагружению пористого ГНС, приведенные в работе [6]. В табл. 2 приведены результаты расчетов с применением программного комплекса Master Professional [7] в сравнении с результатами экспериментов [6].

В [6] показано, что ударно-волновое инициирование ГНС (при нагружении полимерными ударниками) происходит при достижении давления инициирующего импульса 10 ГПа при длительности 0.02 мкс. Для получения данных о кинетике нагружения ВВ в составе слэпперного детонатора была построена трехмерная модель взаимодействия ГНС с малым  $(0.2 \times 0.4 \text{ мм})$  со-

ставным полиимид-фторопластовым слэппером. В результате моделирования получено, что инициирующее давление на границе раздела слэппер—*заряд*  $\Gamma HC$  реализуется в промежутке времени до 0,026 мкс при скорости слэппера не менее 2,8 км/с (табл. 3).

Таблица 2 Сравнение расчетных и экспериментальных результатов

Скорость ударника, км/с	Напряжение в ГНС [6], ГПа	Напряжение в ГНС [7], ГПа
0,503	1,25	1,30
0,814	2,72	2,76
0,951	3,30	3,67
1,164	4,33	4,48
1,346	5,28	5,25

Таблица 3
Давление на фронте ударной волны в ГНС при соударении со слэппером

<i>V</i> , км/с	Р, ГПа
2,20	6,74
2,40	7,68
2,60	8,84
2,80	10,20
3,00	12,00
3,20	12,66
3,40	15,10

#### 3. Моделирование метания ударника в составе слэпперного детонатора

В результате детонации заряда ГНС расширяющиеся продукты взрыва формируют из колпачка (рис. 2,a) или диска (рис. 2,b) ударник, предназначенный для инициирования основного заряда ВВ. Рассмотрим процесс метания ударника продуктами взрыва заряда ГНС. Для численного моделирования поведения продуктов взрыва использовалось уравнение состояния в форме Джонса – Уилкинса – Ли (JWL) [8, 9]:

$$P = A \left( 1 - \frac{w\eta}{R_1} \right) e^{-\frac{R_1}{\eta}} + B \left( 1 - \frac{w\eta}{R_2} \right) e^{-\frac{R_2}{\eta}} + w\rho e, \quad \eta = \frac{\rho}{\rho_0}.$$
 (4)

Для описания поведения конструкционных материалов в условиях ударно-волнового нагружения использовалось УРС в форме Ми – Грюнайзена (1), при этом упругая составляющая давления отождествлялась с давлением Гюгонио. Для определения зависимости скорости полета ударника в слэпперном детонаторе от времени были проведены расчеты по схеме рис. 2. Данные по ударно-волновому нагружению принимались в соответствии с [10].

С целью верификации построенной модели была проведена серия экспериментов, где варьировались различные параметры системы (см. рис. 2): высота втулки H, масса навески ГНС, а также толщина h, материал, тип и глубина утопания  $\Delta$  ударника. В табл. 4 приведены экспериментальные параметры системы, определявшие геометрию математической модели.

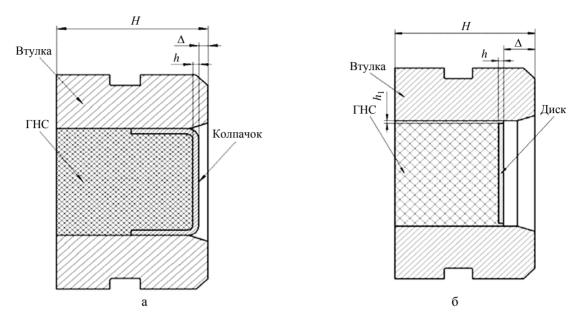


Рис. 2. Втулка слэпперного детонатора, снаряженная ГНС

Таблица 4 Экспериментальные измерения скорости ударника

	Параметры колпачка			
Масса ГНС, мг	Материал, тип ударника	<i>h</i> , мкм	Δ, мм	Скорость, м/с
10	Мі колнонок	100	0,05-0,25	1786
10	Ni, колпачок	100	0,03-0,23	1756
<b>-</b>	Ni namanan	100	1 10	1302
3	Ni, колпачок	100	1,12	1272
10	Ni, диск	95	0,54	1453
10	Ni, диск	50	0,51	2210

Для сравнения результатов численного моделирования с экспериментом на рис. 3 показаны графики зависимости скорости ударника от времени, полученные с помощью экспериментальной методики PDV и в расчетах.

Изложенная методика позволяет оценить влияние различных факторов на скорость метаемого ударника. В частности, было оценено влияние размера зазора  $h_1$  между ударником типа «диск» и втулкой (см. рис.  $2,\delta$ ). На рис. 4 показана зависимость скорости ударника от размера зазора, полученная на расстоянии 0,3 мм от поверхности ударника.

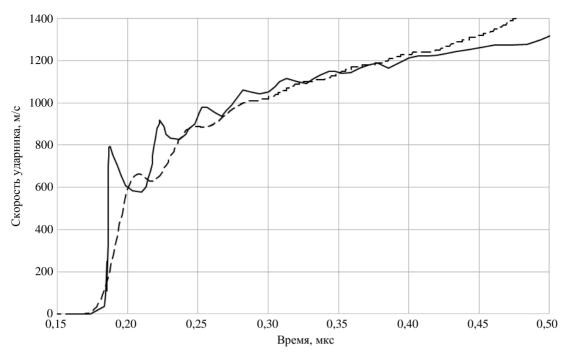


Рис. 3. Результаты измерения скорости ударника экспериментальным методом PDV (——) и расчетные данные (- - -)

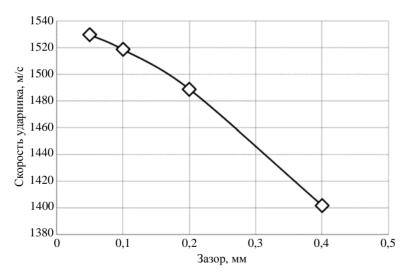


Рис. 4. Зависимость фиксируемой скорости ударника от размера зазора

Видно снижение скорости метания ударника с ростом зазора. Таким же образом могут быть смоделированы различные модификации слэпперного детонатора в условиях изменяющейся конструкции и номенклатуры применяемых конструкционных материалов.

#### Заключение

Разработана методика численного моделирования ряда процессов, протекающих при срабатывании слэпперного детонатора. В частности, создана численная модель формирования и метания ударника продуктами детонации, проведена верификация модели, сделаны выводы о влиянии некоторых параметров системы на скорость ударника.

Методика позволяет прогнозировать поведение слэпперного детонатора в составе боеприпасов и систем инициирования гражданского назначения и, следовательно, снижать затраты на отработку изделий и обеспечение надежности их срабатывания.

#### Список литературы

- 1. Бабкин А. В., Велданов В. А., Грязнов Е. Ф., Имховик Н. А. Средства поражения и боеприпасы. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2008.
- 2. Patent US 4788913A (1971). Flying-plate detonator using a high-density high explosive / Ornellas D. L., Stroud J. R.
- 3. Patent US 5370053A (1993). Slapper detonator / Werling S. V., Williams M. R.
- 4. Глушак Б. Л. Начала физики взрыва. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011.
- 5. Wixom R. R. First-principles prediction of equations of state for molecular crystal explosives // Proc. of the Int. Con. Shock Waves in Condensed Matter. Kiev, 2012. P. 99.
- 6. Хейес Д., Митчелл Д. Уравнение, описывающее поведение пористого гексанитростильбена в ударных волнах // Детонация и взрывчатые вещества. М.: Мир, 1981. С. 392.
- 7. Крючков И. А., Павлов С. В., Руденко В. В. Моделирование физических процессов на гибридных вычислительных системах в рамках программного комплекса Master Professional // Сб. докл. 10-й науч.-техн. конф. «Молодежь в науке». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011.
- 8. Urtiew P. A., Hayes B. Parametric study of dynamic JWL-EOS for detonation products // Физика горения и взрыва. 1991. № 4. С. 126–127.
- 9. Finger, Lee. High Explosives Equation of State // LLL Memorandum, 1972.
- 10. Трунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В. Экспериментальные данные по ударноволновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001.

### The Numerical Modelling of Exploding Foil Initiator Based on Low-Sensitive Explosive

A. V. Sklyarov, P. A. Ustimkin, A. A. Selezenev, S. A. Chevtaev, N. A. Abramov

The results of numerical simulation of processes occurring when the slapper type detonators are triggered are presented. A mathematical model of the loading process of a low-sensitivity explosive hexanitrostilbene by a short-duration pulse has been constructed and verified. The model of throwing a striker formed by explosive detonation products has been verified. Conclusions are drawn about the influence of the detonator design features and the physical properties of the impactor plate material throwable on the speed of its throwing.

#### СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 3

Пикулина Г. Н., Таова С. М.	
<b>Деятельность Центра ядерно-физических данных РФЯЦ-ВНИИЭФ</b>	
по компиляции экспериментальных данных для международной библиотеки EXFOR. Программный комплекс EXFOR-Editor	198
<i>Таова С. М., Генералов Л. Н., Жеребцов В. А.</i> Оцененные значения интегральных сечений реакции <sup>3</sup> H(t, 2n) <sup>4</sup> He	
в низкоэнергетичной области, полученные с учетом	
электронного экранирования	206
Генералов Л. Н., Селянкина С. М., Таова С. М., Жеребцов В. А. Оценка сечений образования радиоактивных ядер <sup>10</sup> Ве	
оценка сечении образования радиоактивных ядер — Бе при взаимодействии дейтронов с <sup>9</sup> Ве	216
ipii bodiimodenoi bini deni ponob e be	210

ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ УДК 539.17+002.63+681.3

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 198 205

# Деятельность Центра ядерно-физических данных РФЯЦ-ВНИИЭФ по компиляции экспериментальных данных для международной библиотеки EXFOR. Программный комплекс EXFOR-Editor

В Институте ядерно-радиационной физики РФЯЦ-ВНИИЭФ с 1973 г. ведутся работы по компиляции экспериментальных данных, получаемых в реакциях взаимодействия заряженных частиц с легкими ядрами. В настоящее время этой деятельностью занимаются сотрудники Центра ядерно-физических данных (ЦЯФД), созданного в 1997 г. Представлены основные направления деятельности ЦЯФД, выделен вклад центра в развитие международной библиотеки экспериментальных ядерных данных EXFOR. Приведено подробное описание программного комплекса EXFOR-Editor, предназначенного для ввода, редактирования и записи в формате EXFOR данных по ядерным реакциям.

Г. Н. Пикулина, С. М. Таова

#### Введение

Центр ядерно-физических данных функционирует в РФЯЦ-ВНИИЭФ с 1997 года [1]. В настоящее время ЦЯФД является одним из десяти тематических центров данных, действующих на территории России, в обязанности которого входит компиляция экспериментальных данных по реакциям взаимодействия заряженных частиц с ядрами. К основным направлениям деятельности центра также относятся: проведение работ по оценке сечений, развитие библиотеки экспериментальных и оцененных ядерных данных SaBa [2], разработка и адаптация существующих программных кодов для расчета сечений по ядерным моделям, создание программного обеспечения по обработке ядерных данных в формате EXFOR [3].

ЦЯФД входит в международное объединение центров данных по ядерным реакциям, действующее под эгидой МАГАТЭ (Nuclear Reaction Data Centre Network – NRDC) [4]. Основная цель международной сети заключается в распространении информации по ядерным реакциям среди мирового сообщества [5].

<sup>©</sup> Ядерная физика и инжиниринг. 2017. Т. 8, № 5. С. 439–444.

#### Компиляция экспериментальных данных

Компиляция экспериментальных данных по ядерным реакциям для международной библиотеки EXFOR – одна из приоритетных задач центров данных, входящих в NRDC. На сегодняшний день библиотека EXFOR является крупнейшей электронной базой экспериментальных данных по взаимодействию нейтронов, заряженных частиц и гамма-квантов с ядрами. В библиотеке EXFOR хранятся экспериментальные данные по интегральным и парциальным сечениям, дифференциальные сечения (угловые распределения, коэффициенты Лежандра, спектры вторичных частиц, дважды дифференциальные сечения и пр.), выходы продуктов деления, выходы из толстых мишеней, резонансные параметры и пр. [6]. Кроме того, EXFOR является удобной и эффективной поисковой системой, которая позволяет не только находить и выбирать необходимую информацию, но и проводить различную обработку экспериментальных данных. К маю 2017 г. библиотека EXFOR включала данные по более чем 21 тысяче экспериментов, свыше 168 тысяч таблиц данных по различным реакциям, около 1,5 миллиона точек данных [7]. Ежегодно ее содержимое пополняется 500–700 работами (Entry) — результатами компиляций, выполняемых центрами ядерных данных [8].

Компиляция экспериментальных данных по взаимодействию заряженных частиц с ядрами ведется в РФЯЦ-ВНИИЭФ с 1973 г. Помимо результатов собственных экспериментов обрабатываются и записываются в соответствующем формате данные из доступных литературных источников. За время своей деятельности ЦЯФД передал в международную библиотеку EXFOR более двух тысяч работ [7].

В настоящее время ЦЯФД ответственен за компиляцию данных по ядерным реакциям, которые получают на российских экспериментальных установках.

#### Оценка сечений ядерных реакций

Еще одним значимым направлением деятельности центра является проведение работ по оценке сечений ядерных реакций. В рамках этой деятельности осуществляется постоянное развитие библиотеки экспериментальных и оцененных данных по взаимодействию заряженных частиц с ядрами для термоядерных приложений SaBa (Sarov Base). Пользовательский интерфейс библиотеки представлен на рис. 1 (см. также цв. вкл.).

Библиотека SaBa – это программный продукт, который включает в себя собственно библиотеку оцененных и экспериментальных данных и набор процедур, позволяющих проводить соответствующую обработку этих данных. Библиотека создавалась на протяжении многих лет коллективом высококлассных специалистов. Первая версия библиотеки была передана в МАГАТЭ в 1999 г. В настоящее время библиотека содержит данные по полным и дифференциальным сечениям, а также скорости реакций взаимодействия изотопов водорода и гелия с легкими ядрами до азота включительно. Сейчас в библиотеке представлены данные для 129 каналов реакций. Оцененные данные охватывают энергетический диапазон от 0 до 20 МэВ. В ходе работ по созданию библиотеки SaBa был накоплен и систематизирован обширный экспериментальный материал — цифровые и графические данные по сечениям ядерных взаимодействий. Были разработаны методы оценки, основанные на описании совокупности экспериментальных данных сплайнфункциями.

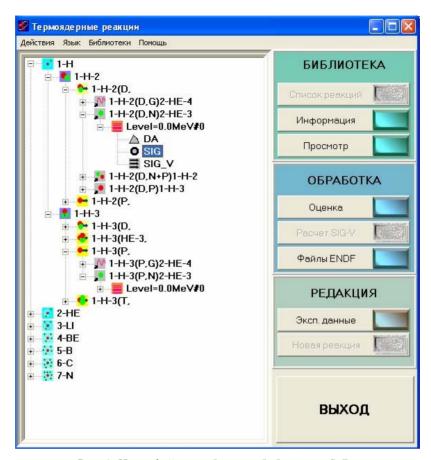


Рис. 1. Интерфейсная оболочка библиотеки SaBa

#### Программный комплекс EXFOR-EDITOR

Компиляция экспериментальных ядерных данных заключается в выполнении следующих задач: поиск материала (анализ статей, книг, технических отчетов, диссертаций, трудов конференций), кодирование выбранной информации в соответствии с правилами библиотеки EXFOR, проверка на соответствие формату EXFOR – обеспечение достоверности и качества вводимых данных.

Формат библиотеки EXFOR был разработан в 1969 г. для обмена экспериментальными данными по ядерным реакциям. Он позволяет преобразовывать большое разнообразие числовых данных по ядерным реакциям, сопровождаемых пояснениями и библиографической информацией, для хранения в базе данных EXFOR [9].

Хорошо продуманная система словарей предоставляет возможность вводить новые типы данных и сопутствующую информацию в виде кодов, не меняя ни формата EXFOR, ни сервисного программного обеспечения. Заслуга разработчиков EXFOR заключается в создании гибкой структуры, которая успешно функционирует уже почти полвека.

Файл в формате EXFOR организован в виде вложенных повторяющихся текстовых блоков. При этом в нем имеются ограничения на длину строки, количество значений в строке таблицы числовых данных, позиции для задания определенных параметров. Чтобы компилировать ядер-

ные данные в формате EXFOR, требуется изучить 400 страниц руководства и хорошо ориентироваться в 41 словаре кодовых и ключевых слов EXFOR [9].

Таким образом, помимо знания сути происходящих физических процессов, специалист, занимающийся компиляцией данных для библиотеки EXFOR, должен уметь кодировать информацию в соответствии с правилами формата EXFOR, используя обозначения из постоянно обновляющихся словарей. Существенной помощью в решении этой трудной задачи является сервисное программное обеспечение, которое оптимизирует процесс компиляции данных и снимает ограничения со стороны формата за счет интерфейсных функций [10].

Программный комплекс EXFOR-Editor – это специализированное программное обеспечение для ввода и редактирования ядерных данных в формате библиотеки EXFOR, разработанное сотрудниками ЦЯФД. Оно учитывает жесткие требования и ограничения формата EXFOR и максимально автоматизирует и упрощает процесс ввода структурированной информации, сокращая число сопутствующих рутинных операций. Одной из целей разработки программного пакета являлось создание готового инструмента, достаточно простого в изучении и использовании, который эффективно и быстро помогает начинающим специалистам освоить компиляцию ядерных данных.

Программный комплекс EXFOR-Editor обрел популярность и у других центров данных по ядерным реакциям. Отклики и просьбы пользователей помогли сформировать и отладить программный пакет в его настоящей конфигурации.

В состав комплекса EXFOR-Editor, структурная схема которого приведена на рис. 2, помимо программных компонент, разработанных в ЦЯФД, входят библиотеки и программы, разработанные Секцией ядерных данных (СЯД – NDS) и Банком данных Агентства по ядерной энергии (Франция) (NEA DB). Программный комплекс EXFOR-Editor – это результат многолетнего плодотворного сотрудничества между ЦЯФД, СЯД МАГАТЭ и другими центрами данных по ядерным реакциям.

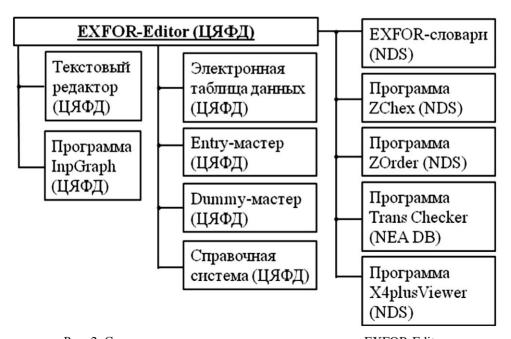


Рис. 2. Структурная схема программного комплекса EXFOR-Editor

Часто источником числовых данных по ядерным реакциям служат статьи из старых журналов, где результаты экспериментов представлены в виде графических зависимостей, причем табличные данные, по которым строились графики, не приводятся. Поскольку запросить числовые данные у авторов экспериментов уже невозможно, то единственный способ получения числовых данных – оцифровка приведенных в статьях графиков [11].

Для ввода числовых данных, получаемых при сканировании исходных документов или из файлов формата PDF, сотрудниками ЦЯФД в рамках программного комплекса EXFOR-Editor разработана программа InpGraph, основное окно которой показано на рис. 3. При помощи этой программы можно обрабатывать графические изображения форматов BMP, JPEG, JPG, TIF, EMF, WMF, полученные из буфера обмена или копированием выделенной области на экране. Основное достоинство программы InpGraph заключается в использовании специальной математической обработки оцифрованных данных для получения числовых значений в координатах физического эксперимента. Такая обработка позволяет оцифровывать графики плохого качества из старых журналов и вычислять ошибку оцифровки, в расчет которой включена также ошибка квантования, возникающая при дискретизации изображения [11].

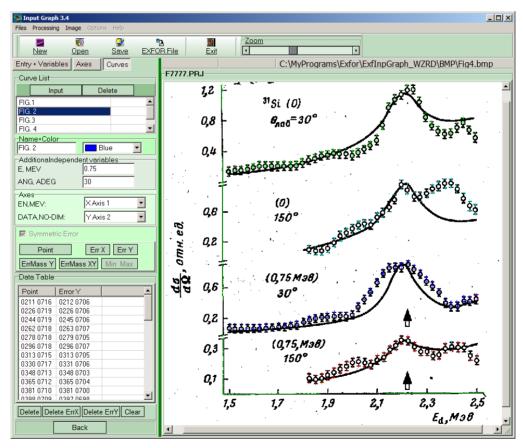


Рис. 3. Программа оцифровки InpGraph

Программа ExfData, являющаяся ядром комплекса EXFOR-Editor, представляет собой редактор, специально усовершенствованный для работы с файлами в формате EXFOR. В программе предусмотрено создание EXFOR-файлов при помощи шаблона или мастера. Такая возможность строго регламентирует структуру нового файла в соответствии с правилами EXFOR, что не только

облегчает работу начинающих специалистов в области компиляции, но и исключает внесение дополнительных ошибок опытными пользователями. Программа ExfData содержит специальные диалоговые окна для редактирования и ввода информации по ключевым словам. Для работы с числовыми данными предусмотрен режим электронной таблицы, в котором осуществляются ввод и редактирование числовых данных, манипулирование со строками и столбцами, проведение расчетов, сортировка значений по трем столбцам, экспорт и импорт таблиц данных. Пример диалогового окна для работы с числовыми данными приведен на рис. 4.

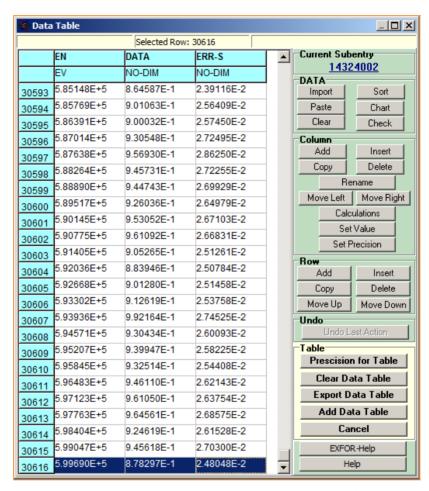


Рис. 4. Работа с числовыми экспериментальными данными в табличном режиме

Основная задача при компиляции ядерных данных в библиотеку EXFOR заключается в обеспечении качества и достоверности вводимой информации [8]. В программном комплексе EXFOR-Editor предусмотрены контроль корректности ввода числовых значений, проверка на вхождение их в допустимый интервал, задание точности представления числовых значений, исключение числовых данных с совпадающими значениями по оси абсцисс и другим независимым переменным, прорисовка введенных данных в виде зависимостей на графике.

EXFOR-Editor осуществляет проверку орфографии в компилируемом файле, вызывает внешние программы для тестирования его на соответствие формату EXFOR. Для дополнительного контроля с помощью подгружаемой программы редактируемый файл может быть представлен на экране в пользовательском формате с расшифровкой всех кодовых и ключевых слов.

Таким образом, разработанная и отлаженная библиотека алгоритмов по вводу и обработке данных в формате EXFOR является базой, на которой строится и развивается EXFOR-Editor. Будущее развитие программного комплекса EXFOR-Editor заключается в создании и совершенствовании его отдельных модулей при постоянном, уже хорошо зарекомендовавшем себя базовом программном обеспечении с привычными для пользователя интерфейсом и функциональными возможностями.

#### Список литературы

- 1. Таова С. М., Пикулина Г. Н. Центр ядерно-физических данных во ВНИИЭФ // Изв. РАН. Сер. Физическая. 2011. Т. 75, № 7. С. 1081–1083.
- 2. Пикулина  $\Gamma$ . Н., Таова С. М., Дунаева С. А. Оптимизация и обеспечение достоверности формата ввода данных в международную библиотеку EXFOR с использованием программного комплекса EXFOR-EDITOR // Вестник Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». 2013. Т. 2, № 1. С. 125−128.
- 3. Zvenigorodskij A. G., Zherebtsov V. A., Lazarev L. M. et al. The Library of Evaluated and Experimental Data on Charged Particles for fusion application. Report IAEA-NDS-191. Vienna, 1999.
- 4. International Network of Nuclear Reaction Data Centres / Ed. by Otsuka N., Dunaeva S. // INDC (NDS) 0401. 2010. Rev. 5.
- 5. Секция ядерных данных МАГАТЭ [Электронный ресурс]. https://www-nds.iaea.org/nrdc.
- 6. Секция ядерных данных МАГАТЭ [Электронный ресурс]. https://www-nds.iaea.org/public/exfor/x4compil/exfor\_input.htm.
- 7. Секция ядерных данных MAГATЭ [Электронный pecypc]. https://www-nds.iaea.org/exfor/x4stat/exfor stat.htm.
- 8. Otuka N., Dupont E., Semkova V. et al. Towards a more complete and accurate experimental Nuclear Reaction Data Library (EXFOR): international collaboration between Nuclear Reaction Data Centres (NRDC) // Nuclear Data Sheets. 2014. Vol. 120. P. 272–276.
- 9. Schwerer O. EXFOR formats description for users (EXFOR Basics). IAEA NDS, 2008.
- 10. Forrest R. A., Zerkin V., Simakov S. Developments of the EXFOR database: possible new formats // Nuclear Data Sheets. 2014. Vol. 120. P. 268–271.
- 11. Дунаева С. А., Курякин А. В. Программное обеспечение по вводу, обработке и записи в формате EXFOR фактографических данных: препринт РФЯЦ-ВНИИЭФ № 43. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1993.

## Activities on Experimental Data Compilation Performed for the International Library EXFOR in RFNC-VNIIEF Center of Nuclear Physics Data. Software Package EXFOR-Editor

G. N. Pikulina, S. M. Taova

Since 1973 there have been being compiled in the Institute of Nuclear Radiation Physics of RFNC-VNIIEF the experimental data in the reactions of charged particle interactions with light nuclei. At present the staff of the Centre of Nuclear Physics Data (CNPD) established in 1997 engaged in compilation. In the article there are presented the CNPD main activities. The contribution of CNPD into the development of the international library of experimental nuclear data EXFOR is marked out. There is described in detail the software package EXFOR-Editor for editing and inputting nuclear reaction data into the EXFOR format.

УДК 539.172.12

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 206 215

# Оцененные значения интегральных сечений реакции <sup>3</sup>H(t, 2n)<sup>4</sup>Hе в низкоэнергетичной области, полученные с учетом электронного экранирования

Представлены метод и результаты анализа с учетом электронного экранирования экспериментальных сечений реакции <sup>3</sup>  $H(t, 2n)^4$  Не, протекающей в газовой среде. Получен потенциал электронного экранирования 121 эВ, с которым рассчитаны значения сечений реакции <sup>3</sup>  $H(t, 2n)^4$  Не, начиная с энергий взаимодействия частиц 100 эВ. По расчетным значениям сечений в низкоэнергетичной области вычислены скорости реакции. Определены коэффициенты усиления для сечений и скоростей реакиий.

С. М. Таова, Л. Н. Генералов, В. А. Жеребцов

#### Введение

Сечения  $\sigma(E)$  ядерных реакций, протекающих при взаимодействии заряженных частиц низких энергий, обычно выражаются через астрофизический S-фактор, определяемый как

$$S(E) = \sigma(E)E \exp(2\pi\eta), \tag{1}$$

где E — энергия столкновения ядер,  $\eta$  — параметр Зоммерфельда. Из-за кулоновского барьера между сталкивающимися ядрами сечение  $\sigma(E)$  при  $E \to 0$  катастрофически падает, в то же время S(E) изменяется относительно медленно, поэтому удобно работать с S-фактором.

В лабораторных условиях при измерении сечений, когда имеются ионизованная налетающая частица и нейтральный атом ядра-мишени, кулоновское поле взаимодействующих ядер экранируется облаком электронов, окружающих ядро-мишень. В результате  $S_s(E)$  (s – обозначение электронного экранирования) становится больше по сравнению со значением  $S_b(E)$ , которое бы получили для столкновения частиц, лишенных атомных электронов (далее это называем голоядерными столкновениями; b – обозначение голоядерных взаимодействий). Это увеличение S-фактора выражают через коэффициент усиления  $S_s(E)/S_b(E)$  [1]

<sup>©</sup> Известия РАН. Сер. Физическая. 2018. Т. 82, № 6. С. 705-710.

$$f = \frac{S_s(E)}{S_b(E)} \approx \exp\left(\pi \eta \frac{U_e}{E}\right),\tag{2}$$

где  $U_e$  — потенциал электронного экранирования (предполагается независимым от энергии), определяется средой, в которой протекает реакция. Согласно (2) значение f=1 при высоких энергиях и возрастает с уменьшением энергии. Выражение (2) справедливо лишь при  $U_e << E$ .

Рост значений *S*-фактора может быть вызван наличием резонансов вблизи порога реакции. В исследуемом энергетическом диапазоне резонансов в реакции  $^{3}$ H(t, 2n) $^{4}$ He не наблюдается.

Для ядерной физики необходимо знать  $S_b(E)$ . Именно эти оцененные данные и приводятся в различных библиотеках (ENDF [2], FENDL [3], ECPL [4], NACRE [5]). Однако для решения многих прикладных и астрофизических задач необходимо знать  $S_s(E)$ . С этой целью в библиотеке оцененных и экспериментальных ядерных данных SaBa [6] внедряются методы оценки экспериментальных данных и расчета скоростей ядерных реакций с учетом электронного экранирования.

В настоящей работе представлены результаты анализа экспериментальных сечений реакции  ${}^{3}$ H(t, 2n) ${}^{4}$ He, протекающей в газовой среде [7–10] при взаимодействии пучка ионов трития ( ${}^{3}$ H $^{+}$ ) с молекулярным тритием ( $T_{2}$ ).

#### 1. Функции описания экспериментальных данных

Экранированный S-фактор в соответствии с (2) записывается в виде

$$S_s(E) = S_b(E) \exp\left(\pi \eta \frac{U_e}{E}\right). \tag{3}$$

Использование выражения (3) для описания всей совокупности экспериментальных данных в широком энергетическом диапазоне связано с большими трудностями вычислительного характера, поэтому в нашей методике проводится разбиение экспериментальных данных энергетической точкой  $E_b$  на две области: при  $E > E_b$  S-фактор принимается голоядерным, а при  $E \le E_b$  – экранированным. Экспериментальные данные в области  $E > E_b$  описываются кубическими сплайнами, как правило, с дефектом 1 – кусочно-полиномиальными функциями третьей степени с непрерывными вторыми производными [6]. Параметрами описания являются положения узлов и сплайн-коэффициенты. S-фактор вычисляется по формуле

$$S_h(E) = C_0 + C_1 h + C_2 h^2 + C_3 h^3, \tag{4}$$

где  $h=E-E_0$ , E — текущая энергия,  $E_0$  — значение энергии узла сплайна,  $E_0 < E < E_{0+1}$ ,  $C_i$ , i=0, 1,2,3 — значения коэффициентов сплайна, соответствующие данному узлу.

При  $E \le E_b$  экспериментальные данные описываются зависимостью

$$S_s(E) = b \exp\left(\pi \eta \frac{U_e}{E}\right),\tag{5}$$

где смысл параметра b будет указан далее. Получим рабочую форму описания данных. В точке  $E_b$  оба вида описания (4) и (5) необходимо сшить:

$$b \exp\left(\pi \eta \frac{U_e}{E_b}\right) = S_b(E_b). \tag{6}$$

#### ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

Далее, используя известную зависимость

$$\pi \eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar V},\tag{7}$$

в которой  $Z_1$ ,  $Z_2$  – атомные номера сталкивающихся частиц 1 и 2, V – скорость столкновения, с учетом соотношения между V и E получим выражение

$$b = S_b \left( E_b \right) \exp \left( -k_z \frac{U_e}{E_b^{3/2}} \right), \tag{8}$$

в котором

$$k_z = 0,4947383399Z_1Z_2\sqrt{\frac{A_1A_2}{A_1 + A_2}},$$
(9)

где  $A_1$ ,  $A_2$  — массовые числа сталкивающихся частиц. Коэффициент 0,4947383399 рассчитан для энергии, измеряемой в МэВ. Из соотношения (8) следует, что b является значением голоядерного S-фактора в точке сшивки, деленным на коэффициент усиления f. Введем обозначение  $v = k_z U_e$ , тогда (8) принимает вид:

$$b = S_b \left( E_b \right) \exp \left( -\frac{v}{E_b^{3/2}} \right). \tag{10}$$

Подставив (10) в (5), получим рабочую зависимость для описания экспериментальных данных в области  $E \le E_b$ 

$$S_s(E) = S_b(E_b) \exp\left[v\left(E^{-3/2} - E_b^{-3/2}\right)\right],$$
 (11)

в которой параметрами описания являются  $S_b\left(E_b\right)$  и  $v=k_zU_e$ . При  $E=E_b$  формула (11) автоматически дает сшивку двух типов описания экспериментальных данных, что обеспечивается выбранной зависимостью (5).

Задача нахождения параметров в (11) упрощается, если описывать логарифм экспериментальных значений S-фактора:  $\ln S_i$ , где  $S_i$  – значение S-фактора при энергии  $E_i$ . Взяв логарифм от обеих частей выражения (11), определим аппроксимирующую функцию для описания преобразованных экспериментальных данных:

$$\ln(S_s(E)) = \ln S_b(E_b) + \nu(E^{-3/2} - E_b^{-3/2}). \tag{12}$$

Найдем минимум функции качества описания

$$\Phi(v) = \sum_{E_i \le E_b} \left\langle \ln S_b(E_b) + v \left( E_i^{-3/2} - E_b^{-3/2} \right) - \ln S_i \right\rangle^2 \omega_i^2, \tag{13}$$

где  $\omega_i = \Delta S_i/S_i$  — вес экспериментальной точки. Экспериментальная ошибка  $\Delta S_i$  делится на  $S_i$  (значение S-фактора в i-точке), потому что описание проводится в логарифмическом масштабе.

Обозначив в (13)  $C_i = E_i^{-\frac{3}{2}} - E_b^{-\frac{3}{2}}$  и  $D_i = \ln \frac{S_b \left( E_b \right)}{S_i}$ , получим функцию

$$\Phi(\mathbf{v}) = \sum (\mathbf{v}C_i + D_i)^2 \,\omega_i^2,\tag{14}$$

которая достигает минимума при

$$v = -\frac{\sum C_i D_i \omega_i^2}{\sum C_i^2 \omega_i^2},\tag{15}$$

то есть при потенциале электронного экранирования

$$U_e = \frac{v}{k_z}. (16)$$

#### 2. Оценка S-фактора реакции ${}^{3}H(t, 2n){}^{4}He$

Построение описания энергетической зависимости S-фактора в области низких энергий начинается с выбора граничной точки  $E_b$ , выше которой описание проводится с помощью сплайнов, а ниже – с помощью экспоненциальной зависимости (рис. 1).

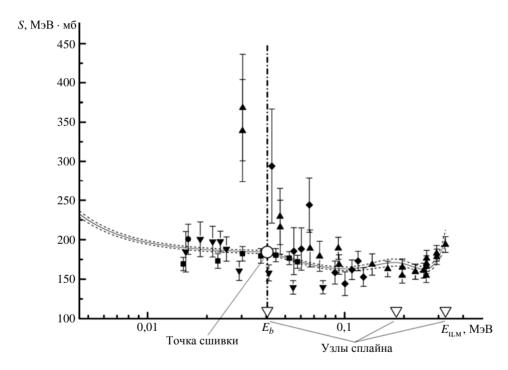


Рис. 1. Процедура описания энергетической зависимости *S*-фактора сплайнами и экспоненциальной зависимостью

Выбор граничной точки обусловлен характером поведения экспериментальных значений в рассматриваемой области. Очевидно, что она должна быть установлена на участке, с которого начинается явный рост значений S-фактора при уменьшении энергии. В большинстве случаев подъем S-фактора фиксируется достаточно легко. Первоначально задается приблизительное значение граничной точки  $E_b$  в соответствии с результатами визуального анализа. Затем проводится описание экспериментальных данных в высокоэнергетичной области  $E > E_b$  с помощью сплайнов. Для этого требуется задать определенное число узлов сплайна, которое обычно не превышает

четырех, включая начальный и конечный, так как кривые достаточно гладкие. Результат описания — гладкая кривая, которая ниже точки  $E_b$  представляет собой экспоненциальную зависимость, выше — сплайн-аппроксимацию. Здесь же определяется значение  $U_e$ . Далее с некоторым шагом изменяется  $E_b$  в область больших и меньших значений. Из всех получаемых результирующих описаний (совместно в областях  $E \le E_b$  и  $E > E_b$ ) выбирается такое, которое имеет минимальное среднеквадратичное отклонение экспериментальных значений от расчетных.

При проведении анализа использовались экспериментальные данные (рис. 2), полученные в работах [7–9, 11, 12] при взаимодействии пучка ионов трития с молекулярным тритием. Охватываемый энергетический диапазон – от 15,6 до 325,4 кэВ. Для построения оцененной кривой был выбран линейный масштаб по оси абсцисс (на рис. 2 аппроксимирующая кривая представлена в логарифмическом масштабе). Наилучшее описание всей совокупности экспериментальных данных было получено для  $E_b = 40,51$  кэВ,  $S_b\left(E_b\right) = (184\pm2,04)$  кэВ·б,  $U_e = (120,5\pm11,0)$  эВ и при значениях коэффициентов сплайна, представленных в табл. 1.

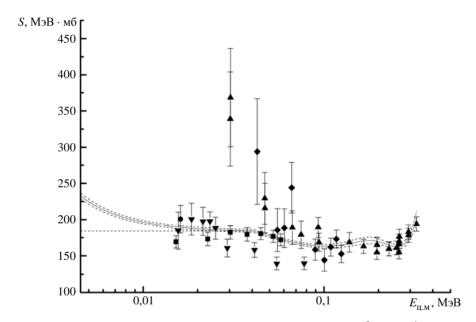


Рис. 2. Оцененная кривая для экранированного *S*-фактора реакции  ${}^{3}$ H(t, 2n) ${}^{4}$ He (сплошная кривая), пунктирная линия – голоядерное взаимодействие. Экспериментальные данные:  $\mathbf{\nabla}$  − [7],  $\mathbf{\Phi}$  − [8],  $\mathbf{\Delta}$  − [9],  $\mathbf{\Phi}$  − [11],  $\mathbf{E}$  − [12]

 $\label{eq:2.2} \begin{tabular}{ll} \begin{t$ 

Узел <i>Е</i> ,	Пафа		Коэффици	енты сплайна	
МэВ	Дефект	$C_0$	$C_1$	$C_2$	$C_3$
0,04052	1	$1,84288 \cdot 10^2$	$-8,22315\cdot10^2$	$9,80397 \cdot 10^3$	$-3,28781\cdot10^4$
0,18296	1	$1,71054 \cdot 10^2$	$-3,05953\cdot10^{1}$	$-4,24586\text{E}\cdot 10^3$	4,23668·10 <sup>4</sup>
0,32540	0	_	-	_	_

Последняя строка таблицы содержит лишь значение энергии конечного узла сплайна — это правая граница интервала определения сплайна. После этой границы осуществляется переход к экстраполяционной формуле. Экстраполяция значений *S*-фактора в область энергий выше 325,4 кэВ выполнена с помощью полинома 1-й степени (табл. 2). На рис. 3 представлены расчетные значения сечений без учета и с учетом электронного экранирования. Видно, что электронное экранирование приводит к росту сечения при энергии ниже 200 эВ.

Таблица 2 Параметры экстраполяции S-фактора в область энергий выше 325,4 кэВ

Voor E MoD	Коэффициенты сплайна	
Узел <i>Е</i> , МэВ	$C_0$	$C_1$
0,32540	$2,02996 \cdot 10^2$	$1,33871 \cdot 10^3$

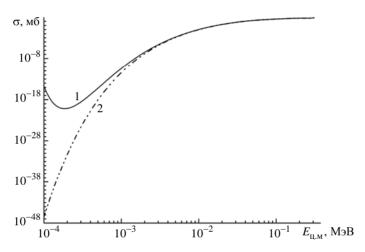


Рис. 3. Оцененные значения сечения реакции  ${}^{3}$ H(t, 2n) ${}^{4}$ He: 1 – экранированное сечение, 2 – голоядерное сечение

В табл. 3 представлены значения экранированного и голоядерного сечений и коэффициента усиления, полученные при различных энергиях взаимодействия ( $\sigma_s(E)$  — экранированное сечение,  $\sigma_b(E)$  — голоядерное сечение).

Таблица 3 Сечения реакции  ${}^{3}$ H(t, 2n) ${}^{4}$ Hе с учетом и без учета электронного экранирования и коэффициент усиления

Е, МэВ	$\sigma_{_S}(E)$ , мб	$\sigma_b(E)$ , мб	f(E)
0,0001	$1,92940 \cdot 10^{-15}$	$3,12226\cdot10^{-47}$	6,17950·10 <sup>31</sup>
0,0002	$7,70900 \cdot 10^{-21}$	$4,46391 \cdot 10^{-32}$	1,72696·10 <sup>11</sup>
0,0005	$6,40510\cdot 10^{-16}$	$9,25990 \cdot 10^{-19}$	$6,91703 \cdot 10^2$
0,001	$3,79642 \cdot 10^{-11}$	$3,78297 \cdot 10^{-12}$	$1,00356 \cdot 10^1$

			Okon lanne 140n. 5
Е, МэВ	$\sigma_s(E)$ , мб	$\sigma_b(E)$ , мб	f(E)
0,005	$1,54741\cdot 10^{-3}$	$1,26934\cdot 10^{-3}$	$1,21907 \cdot 10^0$
0,01	$1,03822\cdot 10^{-1}$	$9,73631 \cdot 10^{-2}$	$1,06634 \cdot 10^0$
0,02	1,73913·10 <sup>0</sup>	$1,70998 \cdot 10^0$	$1,01705 \cdot 10^0$
0,03	$5,54444 \cdot 10^0$	$5,51619 \cdot 10^0$	$1,00512 \cdot 10^0$
0.04051	1.08666.10 <sup>1</sup>	1.08666.10 <sup>1</sup>	1,00000,100

Окончание табл. 3

#### 3. Расчет скорости реакции ${}^{3}H(t, 2n){}^{4}He$

Расчет скорости реакции произведен для газовой среды, в которой  ${}^{3}\mathrm{H}^{+}$  взаимодействует с молекулярным тритием.

С учетом коэффициента усиления для сечения f скорости реакции в предположении максвелловского распределения рассчитываются следующим образом:

$$\langle \sigma v \rangle = \frac{\sqrt{8/\pi}}{\sqrt{M} (kT)^{3/2}} \int_{0}^{\infty} \sigma(E) E e^{-E/kT} e^{\pi \eta \frac{U_e}{E}} dE, \tag{17}$$

где M — приведенная масса, k — постоянная Больцмана, E [МэВ] — энергия столкновения в с.ц.м.,  $\sigma$  [б] — сечение реакции, T — ионная температура среды.

Из выражения (17) видно, что при  $E \to 0$  интеграл расходится. Для устранения этого расхождения был предложен следующий подход. В соответствии с дебаевской моделью экранирования эффективную энергию взаимодействия налетающей частицы с ядром-мишенью записывают как

$$E_{\text{ad}} = E + U_e, \tag{18}$$

где E — энергия налетающей частицы в системе центра масс. Поэтому мы использовали нижний предел интегрирования, равный эффективной энергии взаимодействия. В этом случае при E=0 нижний предел интегрирования равен  $U_e$ .

Для вычисления скоростей реакций используется выражение

$$N_{A} \langle \sigma v \rangle = 3,7313 \cdot 10^{10} M^{-1/2} T_{9}^{-3/2} \int_{U_{e}}^{\infty} \sigma(E) E \exp(-11,605 E/T_{9}) dE,$$
 (19)

где  $N_A$  — число Авогадро,  $T_9 = T/10^9$  K — ионная температура среды. Скорость реакции выражается в см<sup>3</sup>/моль · с. В выражение (19) подставляется значение сечения  $\sigma_s(E)$ , полученное с учетом электронного экранирования.

Расчет скоростей реакции  $^3$ H(t, 2n) $^4$ Hе проводился в диапазоне температуры среды от 0,0001 до  $0,1T_9$  (K) (от 8,62 эВ до 8,62 кэВ). Полагалось, что при более высоких температурах влияние электронного экранирования на скорость реакции окажется пренебрежимо мало. Для описания полученных расчетных значений скоростей реакций использовалась сплайн-аппроксимация (рис. 4). В табл. 4 приведены коэффициенты сплайна оцененной кривой скорости реакции  $^3$ H(t, 2n) $^4$ He.

#### ОЦЕНЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СЕЧЕНИЙ РЕАКЦИЙ $^{3}$ H(t, 2n) $^{4}$ He...

Вне температурного диапазона от  $0{,}0001$  до  $0{,}1T_9$  (К) (ниже  $0{,}0001$  и выше  $0{,}1T_9$ ) проводилась экстраполяция полученных данных с помощью полиномов 1-й степени. В табл. 5 и 6 представлены параметры экстраполяции данных в области низких и высоких температур.

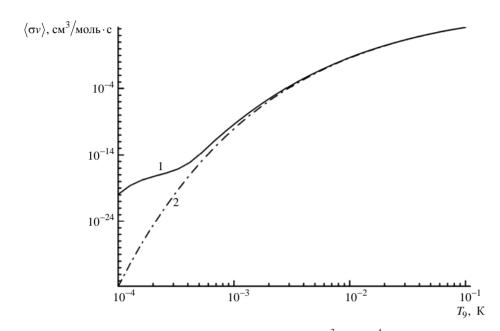


Рис. 4. Оцененные значения скорости реакции  $^3$ H(t, 2n) $^4$ He: скорость с учетом (1) и без учета (2) электронного экранирования

Таблица 4 Значения коэффициентов сплайна аппроксимирующей функции скорости реакции  ${}^{3}$ H $(t,2n)^{4}$ He

Узел	П. 1	Коэффициенты сплайна			
$ln(T_9, K)$	Дефект	$C_0$	$C_1$	$C_2$	$C_3$
-9,21034	1	$-4,58849 \cdot 10^{1}$	1,59369·10 <sup>1</sup>	1,43807·10 <sup>1</sup>	$6,03722 \cdot 10^0$
-7,59137	2	$-3,21578\cdot10^{1}$	1,68448·10 <sup>1</sup>	$-2,19415\cdot10^{0}$	$1,12018\cdot 10^{-1}$
-3,64920	1	$7,01122 \cdot 10^0$	$4,76786 \cdot 10^0$	$-8,69371\cdot 10^{-1}$	$6,73355\cdot 10^{-1}$
-2,30259	0	_	_	_	_

Таблица 5 Параметры экстраполяции скорости реакции  $^3$ H(t, 2n) $^4$ He в область температуры ниже  $0,0001T_9$  (K)

Узел	Коэффициен	ты сплайна
$ln(T_9, K)$	$C_0$	$C_1$
-9,21034	$-4,58849 \cdot 10^{1}$	1,59369·10 <sup>1</sup>

Таблица 6 Параметры экстраполяции скорости реакции  $^3$ H(t, 2n) $^4$ He в область температуры выше  $0,1T_9$  (K)

Узел	Коэффициенты сплайна			
$ln(T_9, K)$	$C_0$	$C_1$		
-2,30259	1,20196·10 <sup>1</sup>	$2,79275 \cdot 10^{1}$		

В табл. 7 представлены значения скоростей реакции  $^3$ H(t, 2n) $^4$ He, рассчитанные с учетом и без учета электронного экранирования, и коэффициента усиления для скорости при различной температуре среды  $\left(\left\langle \sigma v \right\rangle_s -$  значение скорости с учетом экранирования,  $\left\langle \sigma v \right\rangle_b -$  значение скорости без учета экранирования,  $f_R$  — коэффициент усиления для скорости).

Таблица 7 Скорости реакции  ${}^{3}$ H(t, 2n) ${}^{4}$ He с учетом и без учета электронного экранирования и коэффициент усиления

Ионная температура среды, $T_9$ , К	Температура, кэВ	$\langle \sigma v \rangle_s$ , см <sup>3</sup> /моль·с	$\langle \sigma v \rangle_b$ , см <sup>3</sup> /моль·с	$f_R(T_9)$
$1,0000 \cdot 10^{-4}$	$8,6173\cdot 10^{-3}$	$1,18156\cdot 10^{-20}$	$1,51772 \cdot 10^{-34}$	$7,78510 \cdot 10^{13}$
1,6100·10 <sup>-4</sup>	$1,3876 \cdot 10^{-2}$	$1,72109 \cdot 10^{-18}$	$5,46006 \cdot 10^{-28}$	3,15214·10 <sup>9</sup>
$2,5900 \cdot 10^{-4}$	$2,2344 \cdot 10^{-2}$	1,84155·10 <sup>-17</sup>	$2,04367 \cdot 10^{-22}$	9,01099·10 <sup>4</sup>
$1,0830 \cdot 10^{-3}$	$9,3294 \cdot 10^{-2}$	$1,21006 \cdot 10^{-9}$	$2,97634 \cdot 10^{-10}$	$4,06560 \cdot 10^0$
$5,7360 \cdot 10^{-3}$	$4,9430 \cdot 10^{-1}$	$7,64931\cdot 10^{-2}$	$6,02797 \cdot 10^{-2}$	$1,26897 \cdot 10^0$
1,1721·10 <sup>-2</sup>	1,0100·10 <sup>0</sup>	1,34803·10 <sup>1</sup>	$1,20332 \cdot 10^1$	1,12026·10 <sup>0</sup>
$3,0392 \cdot 10^{-2}$	$2,6190 \cdot 10^0$	$2,28113\cdot10^3$	$2,19877 \cdot 10^3$	$1,03746 \cdot 10^0$
$6,2102\cdot 10^{-2}$	$5,3515 \cdot 10^0$	$3,80375 \cdot 10^4$	3,75149·10 <sup>4</sup>	1,01393·10 <sup>0</sup>
$1,0000 \cdot 10^{-1}$	8,6173·10 <sup>0</sup>	$1,65982 \cdot 10^5$	$1,64942 \cdot 10^5$	1,00631·10 <sup>0</sup>

#### Заключение

Представлена методика оценки сечений ядерных реакций с учетом электронного экранирования. Для описания экспериментальных данных использовались кубические сплайны в высокоэнергетичной области и экспоненциальная зависимость при низких энергиях.

Проведена оценка экспериментальных сечений реакции  ${}^{3}$ H(t, 2n) ${}^{4}$ He, протекающей при низких энергиях в газовой среде. Получен потенциал электронного экранирования  $120,5\pm11,0$  эB, который в 3 раза выше потенциала, указанного в работе [13].

Выполнен расчет скоростей реакции с учетом электронного экранирования, в котором нижний предел интегрирования равен потенциалу экранирования.

#### Список литературы

- 1. Salpeter E. E. Electron screening and thermonuclear reactions  $/\!/$  Aust. J. of Phys. 1954. Vol. 7. P. 373-388.
- 2. Библиотека ENDF [Электронный ресурс]. http://www-nds.iaea.org/exfor/endf.htm.
- 3. Библиотека FENDL [Электронный ресурс]. http://www-nds.iaea.org/fendl.
- 4. Hoverton R. J., Dye R. E., MacGregor M. H., Perkins S. T. Index to the LLNL Evaluated Charged-Particle Library (ECPL) // Report UCRL-50400. Vol. 28. DE86012072.
- 5. Библиотека NACRE [Электронный ресурс]. http://www.pntpm.ub.ac.be/Nacre/nacre.htm.
- 6. Zvenigorodskij A. G., Zherebtsov V. A., Lazarev L. M. et al. The Library of Evaluated and Experimental Data on Charged Particles for fusion application // Report IAEA-NDS-191. Vienna, 1999.
- 7. Серов В. И., Абрамович С. Н., Моркин Л. А. Измерение полного сечения реакции  $T(t, 2n)He^4$  // Атомная энергия. 1977. Т. 42. С. 59–61.
- 8. Agnew H. M., Lenard W. T., Argo H. V. et al. Measurement of the cross section for the reaction  $T + T \rightarrow He^4 + 2n = 11.4 \text{ MeV}$  // Phys. Rev. 1951. Vol. 84. P. 862–863.
- 9. Говоров А. М., Ен Л. Г., Осетинский Г. М. и др. Полные сечения реакции T+T в интервале энергии 60-1140 кэВ // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. Вып. 2. С. 383-384.
- 10. Brown R. E., Jarmie N. Hydrogen fusion-energy reactions // Radiat. Effects and Def. in Solids. 1986. Vol. 92. P. 45–57.
- 11. Brune C. R. The  $T(t, 2n)\alpha$ ,  $T(He, np)\alpha$ , and  $He(He, 2p)\alpha$  reactions at low energies // INT Workshop INT 15-58W. Ohio University, 2015.
- 12. Brown R. E., Jarmie N., Hale G. M. Fusion-energy reaction  $H^3(d, \alpha)n$  at low energies // Phys. Rev. C. 1987, Vol. 35, P. 1999–2004.
- 13. Typel S., Bliige G., Langanke K. et al. Microscopic study of the low-energy  ${}^{3}\text{He}({}^{3}\text{He}, 2p){}^{4}\text{He}$  and  ${}^{3}\text{H}({}^{3}\text{H}, 2n){}^{4}\text{He}$  fusion cross sections // Phys. A. 1991. Vol. 339. P. 249–253.

# Evaluated Integral Cross Section of the <sup>3</sup>H(t, 2n)<sup>4</sup>He Reaction in the Low Energy Region Obtained with Regard to Electron Screening

S. M. Taova, L. N. Generalov, V. A. Zherebtsov

A procedure is considered for analyzing  ${}^3H(t,2n)^4He$  reactions proceeding in a gas environment with regard to electron screening. Results from such an analysis are presented. An electron screening potential of 121 eV is obtained. The magnitude of this potential is three times higher than the one given. Starting with a 100 eV energy of particle interaction the cross sections of  ${}^3H(t,2n)^4He$  reaction are calculated using the above potential. The reaction rates are calculated using the evaluated cross sections in the low-energy region. Enhancement factors for cross sections and reaction rates are defined.

УДК 539.172.13

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 216 223

# Оценка сечений образования радиоактивных ядер <sup>10</sup>Ве при взаимодействии дейтронов с <sup>9</sup>Ве

Л. Н. Генералов, С. М. Селянкина, С. М. Таова, В. А. Жеребцов В работе представлена оценка сечений реакции  ${}^9Be(d,x)^{10}Be_{gs}$  от нулевой энергии налетающих дейтронов до 22 МэВ, выполненная на основании всех имеющихся экспериментальных данных с применением математических средств электронной библиотеки SaBa, разработанной в  $P\Phi$ ЯЦ-ВНИИЭ $\Phi$ .

### Введение

Одна из потребностей в ядерных данных по реакциям на бериллии вытекает из задач прогнозирования радиоактивности термоядерных установок. Проведенные расчеты по образованию радиоактивных ядер  $^{10}$ Ве в бланкете NET-TYPE CTR [1] показали, что накопление этих ядер возникает в основном из реакций  $^{10}$ В(n, p) $^{10}$ Ве $_{\rm gs}$  и  $^{9}$ Ве(d, p) $^{10}$ Ве. Для протекания последней реакции быстрые дейтроны рождаются из нейтронных реакций. (Здесь и далее обозначения  $^{10}$ Ве $_{\rm gs}$  и  $^{10}$ Ве равнозначны.)

Настоящая работа обусловлена тем, что в международной библиотеке оцененных данных TENDL (версия 2014 г. [2]) представлена ошибочная оценка сечений реакции  $^9\mathrm{Be}(d,x)^{10}\mathrm{Be_{gs}}$ . В этой библиотеке оценка выполнена с помощью программного кода TALYS [3] на основании экспериментальных данных [4, 5], которые формально отличаются в два раза, а на самом деле хорошо согласуются между собой. В работе [4], выполненной в 1955 г., сечения измерены радиохимическим методом по регистрации  $\beta$ -частиц распада ядер  $^{10}\mathrm{Be_{gs}}$ . При обработке результатов измерений авторы [4] использовали значение периода полураспада  $^{10}\mathrm{Be_{gs}}$ ,  $2,7\cdot10^6$  лет, современное же его значение  $(1,51\pm0,06)\cdot10^6$  лет [6], и его использование понижает данные [4] в 1,788 раза. Аналогичная ситуация [7, см. также цитируемую литературу] наблюдается для реакций  $^{10}\mathrm{Be}(d,p)^{11}\mathrm{Be}$ ,  $^{10}\mathrm{Be}(d,p)^{11}\mathrm{Be}(d,p)^{11}\mathrm{Be}$ ,  $^{10}\mathrm{Be}(d,p)^{11}\mathrm$ 

В [5] сечения образования  $^{10}$ Ве $_{gs}$  получены суммированием измеренных парциальных сечений реакций  $^{9}$ Ве $(d, p_i)^{10}$ Ве $^*(E_i)$ : суммирование ведется до первого ядерно-нестабильного уровня 7,371 МэВ [8]. Такие же данные имеются и при энергии дейтронов 11,8 МэВ [9].

<sup>©</sup> Известия РАН. Сер. Физическая. 2018. Т. 82, № 6. С. 699.

### Экспериментальные сечения реакции ${}^{9}Be(d,x){}^{10}Be_{gs}$

Впервые сечения реакции  ${}^9{\rm Be}({\rm d},~x){}^{10}{\rm Be}_{\rm gs}$  были измерены в [4]: использовался метод регистрации радиоактивных ядер  ${}^{10}{\rm Be}$ , накопленных в облученной бериллиевой мишени, из которой эти ядра переносились в счетчик Гейгера для регистрации  $\beta$ -частиц их распада. По активности  $\beta$ -частиц определялось количество ядер  ${}^{10}{\rm Be}_{\rm gs}$ , образованных в облученной мишени. Данные в этой работе получены в интервале энергий дейтронов от 1 до 22 МэВ.

Сечения реакции  ${}^{9}\text{Be}(d, x){}^{10}\text{Be}_{gs}$  с высокой точностью можно определить (табл. 1) из суммы сечений  $\sigma_{\sum p_i}$  реакций  ${}^{9}\text{Be}(d, p_0){}^{10}\text{Be}_{gs}$ ,  ${}^{9}\text{Be}(d, p_1){}^{10}\text{Be}^*(3,368)$ ,  ${}^{9}\text{Be}(d, p_2){}^{10}\text{Be}^*(5,958)$   ${}^{9}\text{Be}(d, p_3){}^{10}\text{Be}^*(5,9599)$ ,  ${}^{9}\text{Be}(d, p_4){}^{10}\text{Be}^*(6,1793)$ ,  ${}^{9}\text{Be}(d, p_5){}^{10}\text{Be}^*(6,2633)$ . Так как уровни  ${}^{10}\text{Be}$ , лежащие по энергии выше 5 уровня, ядерно-нестабильные, то реакции с их возбуждением вносят малый вклад в образование  ${}^{10}\text{Be}_{gs}$ .

Таблица 1 Уровни  $^{10}$ Ве [8], заселяемые в реакциях  $^{9}$ Ве(d, p<sub>i</sub>)

Номер уровня <sup>10</sup> Ве	Энергия уровня, МэВ	$J^{\pi}; T$	$ au_{1/2}$ или $\Gamma$ , кэ $B$	Тип распада <sup>10</sup> Ве	<i>Q</i> , МэВ	Порог реакции, МэВ
0 или gs	0	0+; 1	1,51·10 <sup>6</sup> лет	β-	4,587	-
1	3,368	2+; 1	180 фс	γ	1,319	_
2	5,958	2+; 1	$\tau_m < 80 \ \varphi c$	γ	-1,371	1,675
3	5,9599	1-; 1		γ	-1,373	1,678
4	6,1793	0+; 1	1,1 пс	γ	-1,591	1,947
5	6,2633	2-; 1		γ	-1,676	2,051
6	7,371	3-; 1	15,7 кэВ	n	-2,784	3,409

Этим методом были получены сечения в [5] при  $E_{\rm d}$  = 5–11 МэВ и в [9] при  $E_{\rm d}$  = 11,8 МэВ (табл. 2). В указанных работах по регистрации протонов были измерены дифференциальные сечения (угловые распределения) реакций  ${}^9{\rm Be}({\rm d},\,{\rm p}_0){}^{10}{\rm Be}_{\rm gs}$ .  ${}^9{\rm Be}({\rm d},\,{\rm p}_1){}^{10}{\rm Be}^*(3,368)$ ,  ${}^9{\rm Be}({\rm d},\,{\rm p}_{2+3}){}^{10}{\rm Be}^*(5,958+5,9599)$ ,  ${}^9{\rm Be}({\rm d},\,{\rm p}_{4+5}){}^{10}{\rm Be}^*(6,1793+6,2633)$ . Из полученных дифференциальных сечений определялись интегральные сечения этих реакций, в сумме составляющие сечение реакции  ${}^9{\rm Be}({\rm d},\,x){}^{10}{\rm Be}_{\rm gs}$ .

Таблица 2 Сечения образования ядер  $^{10}{\rm Be}_{\rm gs}$  при взаимодействии дейтрона с  $^9{\rm Be}$  [5, 9]

$E_{\rm d}$ , МэВ	$\sigma_{\sum p_i}$ , мб	Случайная	$E_{\rm d}$ , МэВ	$\sigma_{\sum p_i}$ , мб	Случайная
u,	2 P1	погрешность, мб	u '	∠ P1	погрешность, мб
5,0	151	2	8,0	97,9	1,5
5,5	142	2	9,0	84,4	1,5
6,0	128	2	10,5	78,0	2,3
6,5	124	2	11,0	68,4	2,3
7,0	118	2	11,8 [9]	67,1	6,4*
7,5	107,2	1,5	_	_	_

<sup>\*</sup> Полная погрешность, систематическая погрешность данных [5] 3 %.

Как было отмечено, основная причина систематического завышения данных [4] связана с использованием в этой работе неверного значения периода полураспада  $^{10}$ Begs. По этой причине результаты [4] завышены в  $K(T_{1/2})=1,788$  раза. Однако и с учетом этого фактора результаты пер-

вой серии измерений [4] будут завышены в  $1,08\pm0,04$ , а второй – в  $1,13\pm0,03$  раза по сравнению с данными [5], т. е. в среднем завышение исправленных данных [4] по сравнению с данными [5] составит  $1,11\pm0,03$  раза. Если же при  $E_{\rm d}=11,8$  МэВ сравнить исправленное значение сечения [4] с величиной [9], то завышение исправленного сечения [4] составит  $1,19\pm0,11$  раза. Таким образом, исправленные данные [4] остаются завышенными относительно данных [5, 9] в среднем в  $K_S=1,15\pm0,04$  раза. Отметим, что, возможно, и современное значение периода полураспада 10Ве  $(1,51\pm0,06)\cdot10^6$  лет [6] завышено. Для настоящей оценки данные [4] были снижены в  $K(T_{1/2})\cdot K_S=2,056$  раза.

При энергиях дейтронов ниже порогов реакций  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,\mathrm{p}_{2+3})^{10}\mathrm{Be}^*(5,958+5,9599)$  и  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,\mathrm{p}_{4+5})^{10}\mathrm{Be}^*(6,1793+6,2633)$  сечение реакции  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,x)^{10}\mathrm{Be}_{\mathrm{gs}}$  равно сумме сечений реакций  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,\mathrm{p}_0)^{10}\mathrm{Be}_{\mathrm{gs}}$  и  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,\mathrm{p}_1)^{10}\mathrm{Be}^*(3,368)$ . Наш анализ существующих экспериментальных данных в этой области энергии можно найти в [5], где также приведены результаты наших измерений в интервале от 3 до 11 МэВ. Для оценки сечений  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,x)^{10}\mathrm{Be}_{\mathrm{gs}}$  в этом энергетическом диапазоне использовались данные анализа из работы [5] (табл. 3).

Таблица 3 Сечения реакций  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,\mathrm{p}_0){}^{10}\mathrm{Be}_\mathrm{gs}$  и  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},\,\mathrm{p}_1){}^{10}\mathrm{Be}^*(3,368)$  при  $E_\mathrm{d}$  < 1,7 МэВ

E MaD	<b>5</b> 16	Полная погрешность	<b>5</b> 115	Полная погрешность	$\sigma_{dp_0} + \sigma_{dp_1}$	Полная погрешность	Литера-
<i>E</i> <sub>d</sub> , МэВ	σ <sub>dp<sub>0</sub></sub> , мб	погрешность σ <sub>dp0</sub> , мб	σ <sub>dp<sub>1</sub></sub> , мб	погрешность σ <sub>dp1</sub> , мб	мб	$\sigma_{dp_0} + \sigma_{dp_1}$ , мб	тура
0,1034	0,0018	$1,4\cdot 10^{-4}$	0,00535	$4 \cdot 10^{-4}$	0,00715	$4,23792 \cdot 10^{-4}$	
0,123	0,00795	4,8.10-4	0,0106	9.10-4	0,01855	0,00102	
0,1425	0,0233	0,0014	0,0382	0,0024	0,0615	0,00278	[13]
0,1504	0,0332	5.10-4	0,0484	6.10-4	0,0816	7,81025·10 <sup>-4</sup>	
0,162	0,0472	0,003	0,0767	0,005	0,1239	0,00583	
0,19	0,22	0,11	0,275	0,13	0,495	0,17029	[14]
0,9	13,6	0,2	15,2	0,5	28,8	0,53852	
1	14	0,2	17,8	0,5	31,8	0,53852	
1,1	13,2	0,2	18,5	0,6	31,7	0,63246	
1,2	13,4	0,4	19,8	0,6	33,2	0,72111	F1 1 1
1,3	14,2	0,2	22,6	0,7	36,8	0,72801	[11]
1,4	15,2	0,4	24,6	0,7	39,8	0,80623	
1,5	14,5	0,6	28	0,8	42,5	1	
1,6	15,2	0,4	33,7	1	48,9	1,07703	
0,359	1,77	0,5	1,64	0,2	3,41	0,53852	
0,463	4,2	0,13	3,334	0,37	7,534	0,39217	
0,567	6,8	0,2	6,09	0,65	12,89	0,68007	
0,708	9,73	0,3	8,32	0,71	18,05	0,77078	
0,718	9,93	0,3	7,17	0,75	17,1	0,80777	
0,728	10,1	0,3	9,18	0,78	19,28	0,8357	
0,739	10,1	0,3	9,59	0,81	19,69	0,86377	[12]
0,749	9,9	0,3	9,85	0,85	19,75	0,90139	
0,758	9,71	0,3	9,4	0,84	19,11	0,89196	
0,769	9,71	0,3	9,78	0,85	19,49	0,90139	
0,778	9,95	0,3	10,2	0,84	20,15	0,89196	
0,789	10,4	0,3	10,6	0,83	21	0,88255	
0,8	10,8	0,3	11,5	0,83	22,3	0,8825	

### Оценка полных сечений реакций в библиотеке SaBa

В библиотеке SaBa [10] экспериментальные и оцененные данные представлены в виде полных сечений реакций и астрофизических S-факторов. Для проведения оценки экспериментальные значения сечений реакций  $\sigma$  преобразуются в астрофизические факторы

$$S(E_{\text{II},M}) = \sigma(E_{\text{II},M}) E_{\text{II},M} \exp\left(\sqrt{\frac{E_{\text{G}}}{E_{\text{II},M}}}\right), \tag{1}$$

где  $E_{\text{ц.м}}$  — энергия в системе центра масс во входном канале;  $E_{ ext{G}}$  — энергия Гамова, определяемая как

$$\sqrt{E_{\rm G}} = 0.98948 z_1 z_2 \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}},\tag{2}$$

 $z_1$ ,  $z_2$  — заряды налетающей частицы и ядра мишени;  $m_1$ ,  $m_2$  [а.е.м.] — массы налетающей частицы и ядра мишени.

Оцененная кривая в библиотеке в общем случае является суммой гладкой и резонансной частей:

$$f = S_p(E) + R_l(E). (3)$$

Описание резонансной части с числом пиков n и фоном степени p проводится на основе выражения Брейта — Вигнера:

$$R_{l}(E) = \sum_{i=0}^{n_{l}-1} \frac{H_{i}(\Gamma_{i}/2)^{2}}{(E - E_{i})^{2}} + \delta_{l} \sum_{j=0}^{p_{l}} a_{j} (E - x_{0})^{j},$$

$$(4)$$

где  $H_i$  – высота пика;  $E_i$  – положение пика;  $\Gamma_i$  – ширина на полувысоте;  $\delta_l$  = 0 или 1 в зависимости от того, учитывается или нет фон резонансной области в окончательном приближении;  $x_0$  – начало интервала, подогнанного данным резонансом  $R_l$ .

Нерезонансные части оцениваемой кривой проводятся с использованием полиномиального описания кубическими сплайнами, которые определены на сетке узлов  $\{x_0 < x_1 < ... x_{n-1} < x_n\}$ . В общем виде гладкая часть выражается как

$$S_p(E) = \sum_{i=0}^p a_i (E - x_0)^i,$$
 (5)

где  $a_i$  — коэффициент сплайна;  $x_0$  — левая граница интервала, на котором определены приближаемые данные.

Приближающая кривая строится путем поиска оптимального набора параметров сплайна – количества узлов, их энергий, дефектов, значения систематической ошибки данных. Оцененная кривая астрофизического S-фактора определяется путем минимизации значения  $\chi^2$ :

$$\chi^{2} = \frac{\sum_{i=1}^{N_d} \left( \frac{S_i - f(E_i)}{\sigma_i} \right)^2}{N_d - N_p},$$
(6)

где  $\{E_i, S_i, \sigma_i\}$  — точка экспериментальных данных с полной ошибкой  $\sigma_i, N_d$  — число этих точек,  $N_n$  — число подгоняемых параметров.

Оцененные значения астрофизического S-фактора в SaBa хранятся в виде набора коэффициентов сплайна. При просмотре данных, записанных в библиотеку, происходит восстановление оцененной кривой по ее коэффициентам.

На рис. 1 представлены оцененные значения полных сечений реакции взаимодействия дейтронов с ядрами  $^9$ Ве с образованием ядра  $^{10}$ Ве, полученные в настоящей работе. Для проведения оценки были использованы два типа подгонки, имеющиеся в SaBa: сплайнами и резонансами. Результирующие резонансные параметры представлены в табл. 4, параметры фонового полинома — в табл. 5. Коэффициенты аппроксимирующего сплайна оцененных значений S-фактора реакции  $^9$ Ве(d, x) $^{10}$ Ве приведены в табл. 6.

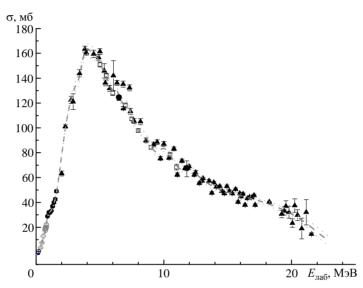


Рис. 1. Оцененные значения полных сечений реакции  ${}^{9}\text{Ве}(d, x){}^{10}\text{Ве}$ : **▲** − [4], • − [11], □ − [5], ▼ − [9], ◊ − [12], **◄** − [13], ○ − [14], пунктир − оцененная кривая

Таблица 4 Значения резонансных параметров оцененной кривой *S*-фактора реакции  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},x){}^{10}\mathrm{Be}$ 

Номер пика	Е, МэВ	Г, МэВ	Н, мб∙МэВ
1	$5,9198 \cdot 10^{-1}$	$5,7938 \cdot 10^{-2}$	$1,2988 \cdot 10^3$

Таблица 5 Значения коэффициентов полинома, описывающего фон резонансной области

Степень	E MaD	Коэфф	рициенты полинс	ома
полинома	$E_0$ , МэВ	$A_0$	$A_{ m l}$	$A_2$
2	4,9386·10 <sup>-1</sup>	$6,9993 \cdot 10^3$	$-2,8623\cdot10^{2}$	-5,7607

Таблица 6 Значения коэффициентов сплайна оцененной кривой S-фактора реакции  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},x){}^{10}\mathrm{Be}$ 

Энергия узла	п 1		Коэффицие	нты сплайна		
сплайна, МэВ	Дефект	$C_0$	$C_1$	$C_2$	$C_3$	
0,08451	1	$1,27268 \cdot 10^4$	$-1,33096\cdot10^4$	$-8,99256 \cdot 10^4$	1,31766·10 <sup>5</sup>	
0,65580	1	$3,42056\cdot10^{2}$	1,29559·10 <sup>4</sup>	1,35902·10 <sup>5</sup>	$-3,30705\cdot10^6$	
0,69714	2	$8,76286 \cdot 10^2$	$7,23542 \cdot 10^3$	$-1,79572 \cdot 10^5$	5,50384·10 <sup>5</sup>	
0,83248	3	$-6,92294 \cdot 10^{1}$	$-1,11274\cdot 10^4$	$2,25507 \cdot 10^4$	$-1,05022 \cdot 10^4$	
1,67882	1	$2,99370 \cdot 10^2$	$4,47582 \cdot 10^3$	$-4,11460\cdot10^3$	$1,18356\cdot 10^3$	
2,64833	2	$1,84977 \cdot 10^3$	$-1,65022 \cdot 10^2$	$1,09227 \cdot 10^4$	$-1,43690\cdot10^4$	
3,05768	1	$2,62688 \cdot 10^3$	$1,55409 \cdot 10^3$	$-6,72310\cdot10^3$	$5,11423\cdot10^3$	
3,74710	2	$2,17865\cdot 10^3$	$-4,23539 \cdot 10^2$	$-2,79540\cdot10^{3}$	$2,12838 \cdot 10^3$	
4,50117	2	$1,18236\cdot 10^3$	$-1,00870\cdot10^3$	$-4,64849 \cdot 10^3$	$9,87924 \cdot 10^3$	
4,97515	2	$7,11907 \cdot 10^2$	$1,24308 \cdot 10^3$	$-7,09866 \cdot 10^3$	$6,54405 \cdot 10^3$	
5,66458	2	$3,39288 \cdot 10^2$	$7,86439 \cdot 10^2$	$-3,89105 \cdot 10^3$	$1,20623 \cdot 10^3$	
6,11702	2	$1,03180 \cdot 10^{1}$	$-1,99373 \cdot 10^3$	$3,17278 \cdot 10^3$	$-1,73088\cdot10^3$	
6,95726	1	$-4,51684\cdot10^{2}$	$-3,27963\cdot 10^2$	$-1,19029\cdot10^3$	$1,38997 \cdot 10^3$	
7,92677	2	$-6,21788\cdot 10^2$	$1,28356 \cdot 10^3$	$-2,36260\cdot10^3$	$9,87929 \cdot 10^2$	
9,41335	2	$-6,89257 \cdot 10^2$	$8,08915 \cdot 10^2$	$-1,01520\cdot10^3$	$3,62104 \cdot 10^2$	
10,53367	1	$-5,48036\cdot 10^2$	$-1,02323\cdot 10^2$	$2,01824 \cdot 10^2$	$-3,53222 \cdot 10^{1}$	
12,19261	1	$-3,23614\cdot10^{2}$	$2,75675 \cdot 10^2$	$2,60317 \cdot 10^{1}$	-7,31535	
17,62186	0	_	_	_	_	

Последняя строка табл. 6 содержит лишь значение энергии конечного узла сплайна. Это правая граница интервала определения сплайна. За ней осуществляется переход к экстраполяционным формулам. В настоящей работе для получения продолжений оцененной кривой в область низких (менее  $0.08451~\mathrm{Mp}$ ) и высоких (более  $17.62186~\mathrm{Mp}$ ) энергий использовались полиномы первой степени. Полином первой степени представляет собой прямую линию с сохранением угла наклона, определенного ходом кривой в предыдущем интервале оценки. Коэффициенты экстраполирующего полинома аппроксимирующей функции S-фактора реакции  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d}, x){}^{10}\mathrm{Be}_{\mathrm{gs}}$  указаны в табл. 7.

Таблица 7 Значения коэффициентов сплайна оцененной кривой S-фактора реакции  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},x){}^{10}\mathrm{Be}_\mathrm{gs}$  при экстраполяции в область низких и высоких энергий

Направление	Тип полинома,	Гип полинома, Энергия узла Коэффициенты спла		ты сплайна
экстраполяции	степень	сплайна, МэВ	$C_0$	$C_1$
Менее 0,08451 МэВ	1	0,08451	1,27268·10 <sup>4</sup>	$-1,3310\cdot10^4$
Более 17,62186 МэВ	1	17,62186	$7,69701 \cdot 10^2$	$-8,8558 \cdot 10^{1}$

Как указано выше, при просмотре данных в библиотеке SaBa происходит восстановление оцененной кривой по ее коэффициентам. С использованием указанных в табл. 4, 5 коэффициентов по формуле (2) вычисляются значения резонансной части оцененной кривой. Гладкая часть аппроксимирующей функции астрофизического S-фактора вычисляется с применением коэффициентов сплайна (табл. 6 и 7) по формуле

$$S(E) = C_0 + C_1 h + C_2 h^2 + C_3 h^3, (7)$$

где  $h = E - x_0$ , E – выбранное значение энергии,  $x_0$  – значение энергии узла сплайна,  $x_0 < E < x_{0+1}$ ,  $C_i$  (i = 0, 1, 2, 3) – значения коэффициентов сплайна, соответствующие данному узлу.

Из полученных значений астрофизических *S*-факторов полное сечение реакции  ${}^{9}$ Be(d, x) ${}^{10}$ Be рассчитывается с использованием формулы (1).

Авторами было проведено сравнение результатов настоящей работы с данными библиотеки TENDL, версия 2014 г. (программный код TALYS). На рис. 2 представлены зависимости оцененных значений полных сечений реакции  ${}^9\mathrm{Be}(\mathrm{d},x){}^{10}\mathrm{Be}$  от энергии налетающих частиц, полученные авторами и приведенные в библиотеке TENDL. Из рисунка видно, что значительные расхождения наблюдаются в интервале энергии 2,5 $-10\,\mathrm{M}$ эВ. Максимальное отличие в значениях сечений наблюдается при энергии налетающих частиц около 5 МэВ. Оцененные значения сечений из библиотеки SaBa при этой энергии почти в два раза превышают значения сечений из библиотеки TENDL-2014.

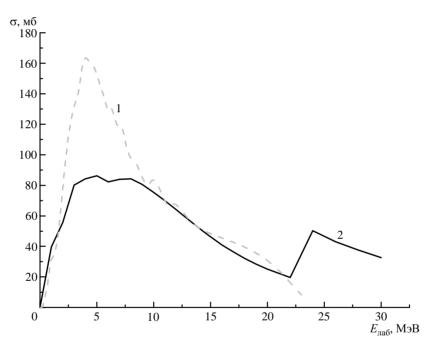


Рис. 2. Сравнение оцененных данных из библиотек SaBa (1) и TENDL-2014 (2)

### Заключение

Выполнен подробный анализ экспериментальных данных по полным сечениям образования радиоактивных ядер  $^{10}$ Ве при взаимодействии дейтронов с  $^{9}$ Ве. Выполнена перенормировка данных [4], которой объясняется использование в этой работе неверного значения периода полураспада  $^{10}$ Ве $_{\rm gs}$ . На основании проведенного анализа и отбора экспериментальных значений в библиотеке SaBa получена оценка полных сечений реакции  $^{9}$ Ве(d, x) $^{10}$ Ве. Сравнение оцененных данных из библиотек SaBa и TENDL-2014 выявило наличие существенных разногласий в представленных значениях сечений.

### Список литературы

- 1. Beynon T. D., Sim B. S. <sup>10</sup>Be and <sup>14</sup>C production rates in NET-TYPE CTR blankets // Ann. Nucl. Energy. 1990. Vol. 17, N 5. P. 271–280.
- 2. Koning A. J., Rochman D. TALYS-based evaluated nuclear data library [Electronic resource]. ftp://ftp.nrg.eu/pub/www/talys/tendl2014/tendl2014.html.
- 3. Koning A. J., Rochman D. Modern nuclear data evaluation with the TALYS code system // Nucl. Data Sheets. 2012. Vol. 113. P. 2841–2870.
- 4. Heft R. E., Libby W. F. Absolute cross sections for deuterons on beryllium // Phys. Rev. 1955. Vol. 100. P. 799–815.
- 5. Генералов Л. Н., Абрамович С. Н., Звенигородский А. Г. Сечения реакций  ${}^{9}$ Be(d,  $p_{0,1}$ ) и  ${}^{9}$ Be(d,  $t_{0}$ ) // Изв. РАН. Сер. Физическая. 2000. Т. 64. С. 440–445.
- $6.\ Audi\ G.\ et\ al.\ The\ NuBase\ evaluation\ of\ nuclear\ and\ decay\ properties\ //\ Nucl.\ Phys.\ 2003.\ Vol.\ A729.\ P.\ 1.$
- 7. Goosman D. R., Kavanagh R. W. Cross sections for  $^{10}Be(d, p)^{11}Be$ ,  $^{10}Be(d, \alpha)^8Li$  and  $^{10}Be(p, \gamma_0)^{11}B$  // Phys. Rev. C. 1973. Vol. 7. N 4. P. 1717–1720.
- 8. Ajzenberg-Selove F. Energy levels of light nuclei A = 5 10 // Nucl. Phys. 1979. Vol. A320. P. 1.
- 9. Schmidt-Rohr U. et al. The angular proton distributions from  ${}^{9}\text{Be}(d, p)^{10}$ ,  ${}^{12}\text{C}(d, p)^{13}\text{C}$ ,  ${}^{16}\text{O}(d, p)^{17}\text{O}$  and  ${}^{40}\text{Ca}(d, p)^{41}\text{Ca}$  reactions near energy 11.8 MeV // Nucl. Phys. 1964. Vol. 53. P. 77–87.
- 10. Zvenigorodskij A. G., Zherebtsov V. A., Lazarev L. M. et al. The library of evaluated and experimental data on charged particles for fusion application // Report IAEA-NDS-191, Dec. 1999.
- 11. Zwieglinski B., Saganek A., Sledzinska I. et al. Direct and resonance processes in  ${}^{9}\text{Be}(d, p_{0,1})^{10}\text{Be}$  and  ${}^{9}\text{Be}(d, t_0)^{8}\text{Be}$  at low energies // Nucl. Phys. A. 1975. Vol. 250. P. 93–105.
- 12. Annegarn J., Mingay D. W., Sellschop J. P. F. et al. Evidence for a nuclear level in  $^{11}$ B at 16.43 MeV // Phys. Rev. C. 1974. Vol. 9. P. 419.
- 13. Yan J., Cecil F. E., McNeil J. A. et al. Deuteron-induced reactions on <sup>9</sup>Be, <sup>10</sup>B, and <sup>11</sup>B at low energies // Phys. Rev. C. 1997. Vol. 55. P. 1890–1900.
- 14. Perchereau J. Investigation of the deuteron-induced reactions (d, p) and (d, t) on  ${}^9\text{Be}$  at the energy range 120-200~keV // Rapport CEA-R-4070. 1971.

# Evaluation of Cross Section of <sup>10</sup>Be Radioactive Nuclei Production at Deuteron Interaction with <sup>9</sup>Be

L. N. Generalov, S. M. Selyankina, S. M. Taova, V. A. Zherebtsov

The evaluation of  ${}^9Be(d, x)^{10}Be_{gs}$  reaction at deuteron energies from 0 to 22 MeV is presented in the paper. It has been obtained using all the experimental data obtained using mathematical equipment of the SaBa electron library designed in RFNC-VNIIEF.

# СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 4

Куделькин В. Б., Бабич Л. П., Гриневич Б. Е., Ивановский А. В.,	
Краев А. И., Шаповалов Е. В.	
Сверхмощные дисковые электромагнитные генераторы	
электромагнитной энергии для исследований в области	
высоких плотностей энергии22	6

# ВЗРЫВО-МАГНИТНЫЕ ГЕНЕРАТОРЫ

УДК 621.318

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 226 239

# Сверхмощные дисковые взрывомагнитные генераторы электромагнитной энергии для исследований в области высоких плотностей энергии

В. Б. Куделькин, Л. П. Бабич,

Б. Е. Гриневич, А. В. Ивановский,

А. И. Краев, Е. В. Шаповалов

Приведен обзор многомодульных дисковых взрывомагнитных генераторов микросекундных импульсов электромагнитной энергии до сотен МДж, работа которых основана на преобразовании энергии взрыва в электромагнитную энергию (магнитная кумуляция). В общих чертах обрисованы основные принципы работы ДВМГ. Кратко описаны ДВМГ с профилированными дисковыми модулями. Особое внимание уделено менее дорогостоящим модернизированным ДВМГ с плоскими дисковыми модулями. Приведены экспериментальные и расчетные импульсы тока и временные зависимости производной тока. При сохранении выходных характеристик ДВМГ с профилированными дисками коэффициент преобразования внутренней энергии ВВ в электромагнитную энергию ДВМГ с плоскими дисками в два раза выше; такие ДВМГ являются более быстродействующими, технологичными и менее дорогостоящими.

### Введение

Для решения важных задач современной науки и техники в области высоких плотностей энергии требуются мощные импульсные источники энергии с запасом 10-100 МДж, способные обеспечить в различных нагрузках импульсы тока с амплитудой 20-200 МА. Такие источники необходимы в работах по проблеме управляемого термоядерного синтеза (УТС), для ускорения металлических пластин и оболочек до сверхвысоких скоростей в исследованиях по физике плазмы и твердого тела, для генерации сверхвысоких давлений и в других областях физики высоких плотностей энергии, в технике и технологиях.

Получение импульсов тока со столь огромной амплитудой и длительностью порядка десятков и сотен наносекунд, требуемой, в частности, в проблеме УТС, является нетривиальной задачей. Для ее решения в 1951 г., т. е. в начале исследований по УТС, А. Д. Сахаров предложил использовать в качестве первичного носителя энергии взрывчатое вещество (ВВ), а для преобразования

<sup>©</sup> IEEE Transactions on Plasma Science. 2018. Vol. 46. P. 148–155 [DOI: 10.1109/TPS.2017.2772920].

энергии взрыва в электромагнитную энергию — эффект магнитной кумуляции, основанный на сжатии давлением продуктов взрыва проводящего контура с введенным в него от внешнего источника магнитным потоком [1-3]. Наиболее подходящим инструментом для достижения термоядерного зажигания в схемах с инерционным удержанием в настоящее время считаются лазерные установки, уникальные по создаваемой ими концентрации энергии. Однако, возможно, наиболее быстрый и дешевый подход к достижению зажигания предоставляют устройства, преобразующие внутреннюю энергию ВВ в энергию электромагнитного поля [4].

Этот подход оказался очень плодотворным. В процессе реализации идеи магнитной кумуляции были разработаны спиральные взрывомагнитные генераторы (СВМГ) (рис. 1) [3, 5, 6] и более мощные быстродействующие дисковые взрывомагнитные генераторы (ДВМГ) [7], в которых СВМГ используются в качестве внешнего источника (предусилителя), создающего начальный магнитный поток в ДВМГ.

При построении ДВМГ использовался модульный принцип. Конструкция генератора состоит из отдельных дисковых модулей, включенных последовательно и питающих одновременно общую внешнюю нагрузку (рис. 2). Число модулей определяется выходной энергией, требуемой для решения конкретной экспериментальной задачи.

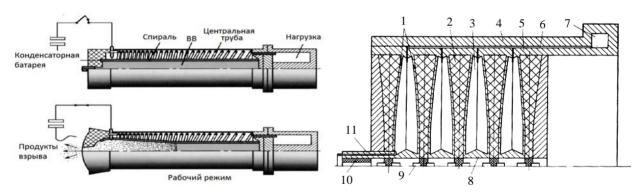


Рис. 1. Схема спирально-коаксиального генератора МК-2

Рис. 2. Облик многомодульного ДВМГ (обозначения см. в тексте)

Принцип построения ДВМГ заключается в следующем. Металлические пластины (диски) 1, соединенные попарно в центре токопроводящими перемычками 8 и образующие полости сжатия магнитного потока 3, установлены друг за другом в цилиндрическом корпусе 4, внутренняя поверхность которого покрыта диэлектриком 6. Смежные пластины соседних пар пластин соединены между собой по периметру токопроводящими кольцами 5 с образованием объемов, заполненных зарядами ВВ 2, причем кольцо первого заряда соединено через источник питания генератора с одним концом корпуса 4, а кольцо последнего заряда через цепь нагрузки 7 – с другим концом корпуса 4. Точки инициирования 9 синхронного подрыва зарядов 7 расположены на оси симметрии конструкции. Внешний источник начального магнитного потока подключается к переходнику 11, отключение генератора от источника питания производится замыканием радиальной щели давлением продуктов взрыва заряда ВВ 10.

При достижении в генераторе магнитного потока заданной величины давлением продуктов взрыва заряда ВВ 10 электрический контур генератора замыкается, и таким образом введенный источником питания магнитный поток захватывается. В этот же момент с помощью системы электродетонаторов 9 синхронно подрываются заряды ВВ 7. Под действием продуктов взрыва токопроводящие пластины 1 одновременно сжимают магнитный поток во всех полостях 3 и вытесняют его в нагрузку 7. На рис. 3 показан процесс работы ДВМГ, описанный выше.

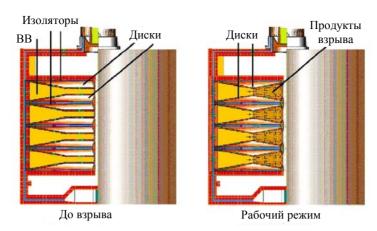


Рис. 3. Процесс работы ДВМГ

В данной статье приведен обзор ДВМГ различного калибра. В разделе 1 кратко обсуждаются изначально развитые ДВМГ с профилированными дисковыми модулями (семейство «Поток»). В разделах 2 и 3 в общих чертах описана техника численного моделирования, изложены результаты моделирования и описаны эксперименты с модернизированными ДВМГ с плоскими модулями.

### 1. ДВМГ с профилированными дисками

Прорыв в развитии ДВМГ произошел в начале 1970-х гг., когда во ВНИИЭФ были проведены первые испытания многомодульных ДВМГ с профилированной поверхностью пластин, сжимающих магнитный поток [8]. Сложный профиль проводников обеспечивал плавный вывод магнитного потока из полостей сжатия без его потерь.

Результаты первых испытаний ДВМГ с профилированными дисковыми модулями были впечатляющими: в 5-элементном генераторе диаметром 400 мм начальный ток 6,5 МА был усилен до 90 МА за время ~5 мкс; электромагнитная энергия в нагрузке составила ~10 МДж. Возможность увеличения энергии путем наращивания числа элементов была проверена в 1984 г. в эксперименте с 10-модульным ДВМГ диаметром 400 мм, в котором амплитуда импульса тока и энергия магнитного поля достигли 107,8 МА и 27,5 МДж соответственно [6]. Коэффициент преобразования энергии ВВ (5 МДж/кг) в электромагнитную энергию составил 6,8 % [9]. В это же время отрабатывались ДВМГ большого и малого классов с диаметрами 1000 и 250 мм соответственно. Исследования, выполненные в 1970–1980 гг., завершились созданием ДВМГ так называемого семейства «Поток» с профилированными дисковыми модулями и зарядами ВВ диаметром 250, 400 и 1000 мм [10]. В табл. 1 приведены основные характеристики таких ДВМГ.

Дальнейшее развитие ДВМГ шло по двум направлениям: увеличение индуктивности проводников, ограничивающих полости сжатия, с целью увеличения генерируемой энергии электромагнитного поля [11] и уменьшения массы ВВ; повышение КПД генератора путем замены профилированных дисковых модулей плоскими с формированием профиля треугольными металлическими вставками в полостях сжатия [12]. Вставки со столь простой топологией позволяют избежать профилирования дисков, требующего применения довольно сложной технологии. На рис. 4 представлены эскизы ДВМГ: семейства «Поток» [10], ДВМГ с увеличенной индуктивностью полости сжатия (схема 1) [11] и с плоскими дисковыми модулями (схема 2) [12].

250

Характеристики ДВМГ семейства «Поток»

п..... прмг

Таблица 1

1000

диаметр дымі, мм	230	400	1000
Число модулей	30	10-25	5-15
Вырабатываемая энергия, МДж	10-30	20-60	100-500
Ток ДВМГ, МА	30-70	50-160	130-400
Характерное время нарастания тока τ, мкс	4,0	6,0	12,0
Конечная индуктивность, нГн	10-15	5-10	2-5
Масса заряда дискового элемента, кг	1,6	6,7	54,0

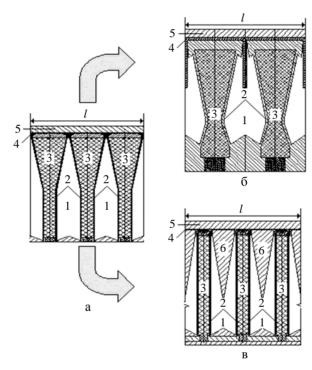


Рис. 4. Эскизы ДВМГ: а – семейства «Поток» с профилированными дисковыми модулями, б – семейства «Поток» с увеличенной индуктивностью полости сжатия (схема 1); в – с плоскими модулями (схема 2); 1 – полости сжатия, 2 – медные диски, 3 – заряды ВВ, 4 – волновая линия, 5 – обратный токопровод, 6 – металлические инертные вставки

Рост индуктивности проводников, формирующих полости сжатия, согласно схеме 1 достигнут путем увеличения расстояния между дисками и усложнения профиля медных дисков. По этой схеме в последние годы отработаны ДВМГ с зарядами ВВ диаметром 240 и 480 мм [13, 14], генерирующие импульсы тока с амплитудами от 60 до 100 МА за время от 4 до 10 мкс при выходной энергии от 20 до 100 МДж.

ДВМГ по схеме 2 отличаются от ДВМГ семейства «Поток» с профилированными модулями уменьшенной массой ВВ и, соответственно, более высоким КПД. Благодаря плоской геометрии их изготовление проще и обходится дешевле, чем ДВМГ семейства «Поток» [15], что открывает перспективы проектирования ДВМГ любого калибра без предварительной экспериментальной отработки [16]. В следующем разделе изложены результаты численного моделирования и экспериментов с ДВМГ по схеме 2.

### 2. Методика численного моделирования. Результаты расчетов

Общая методика численного моделирования ДВМГ содержит:

- двумерный гидродинамический расчет детонации ВВ и динамики продуктов взрыва;
- МГД-расчет смещения дисков под действием давления продуктов взрыва с учетом противодавления магнитного поля;
- расчеты диффузии магнитного поля в диски и передающие линии с учетом расширения линий под действием противодавления магнитного поля;
- возможность учета дополнительных потерь магнитного потока и расчета некоторых режимов работы ДВМГ, отличающихся от нормальных.

Подробное описание методики приведено в работе [17], а сравнение расчетов с данными некоторых экспериментов – в работах [9, 18].

Дополнительные возможности методики моделирования ДВМГ с плоскими дисками. Общая схема ДВМГ с тремя полостями сжатия приведена на рис. 4,в. Она имеет ряд особенностей, которые в какой-то степени могут быть учтены в расчетах.

- Любой ДВМГ имеет центральные полости и две боковые полуполости. Центральные полости содержат металлические инертные вставки, боковые полуполости ограничены медными дисками и боковыми металлическими стенками, причем геометрия этих полуполостей может быть отлична от половины центральной полости.
- Вставка 6 (см. рис. 4, $\epsilon$ ) может быть покрыта слоем изолятора (лавсан) толщиной 25–75 мкм, вертикальные зазоры на выходе из полостей содержат изолятор толщиной 0,7–1,2 мм.
  - Токовый контур генератора обычно изготавливается из меди, алюминия или железа.
- ullet В конкретной конструкции генератора возможны дополнительные элементы, обусловленные особенностями системы запитки, например узел отключения от СВМГ в момент закоротки контура.

Для учета этих особенностей конструкции генератора в методику и программу расчета ДВМГ были внесены следующие дополнения:

- 1. Поскольку динамика краевых дисков отличается от динамики внутренних дисков, проводятся два дополнительных двумерных расчета для описания движения краевых дисков к правой и левой боковым стенкам генератора с учетом различной геометрии стенок.
- В ДВМГ с большим количеством модулей (больше 5-7) отличие основных характеристик (например, индуктивности или радиуса окружности контакта краевых полуполостей от центральных полостей) не оказывает заметного влияния на работу генератора. Для ДВМГ с 2-3 модулями влияние боковых неполных элементов может быть существенным.
- 2. Учет изоляторов вдоль боковых стенок и на вставках, которые могут приводить к задержке замыкания диска с корпусом генератора или с инертными металлическими вставками и, как следствие, к дополнительным потерям магнитного потока.
- 3. Для расчета потерь магнитного потока в токовом контуре, составленном из разных металлов, в программу введена возможность дополнительного решения уравнений диффузии магнитного поля для участков стенок, изготовленных из алюминия и стали. В стандартном варианте расчета задается «классическая» проводимость металлов по Кнопфелю [19].

Методические дополнения, введенные в программу расчета ДВМГ для учета некоторых конструктивных особенностей генераторов с плоскими модулями, проверены путем сравнения экспериментальных и расчетных производных тока в экспериментах с одним, двумя, тремя и десятью модулями. В расчетах были учтены практически все конструктивные особенности экспериментальных сборок: материал дисков – медь, вставки – алюминий, боковые стенки – сталь, наличие дополнительной изоляции, подводящая линия для запитки генератора и т. п. Графики расчетных и экспериментальных производных тока приведены в разделе 3.

Результаты расчетов динамики дисков проверены в газодинамических экспериментах, в которых контактными датчиками измерена зависимость радиуса окружности контакта от времени. Расчетные и экспериментальные данные, полученные для дискового модуля диаметром 250 мм, приведены на рис. 5.

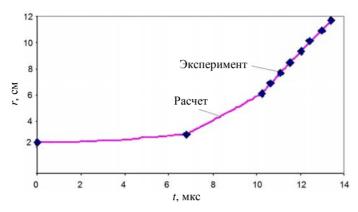


Рис. 5. Зависимость радиуса точки контакта от времени

### 3. Экспериментальная отработка ДВМГ с плоскими модулями

**ДВМГ малого класса.** Экспериментальная отработка ДВМГ малого класса диаметром 250 мм проводилась на двух- и трехмодульных генераторах [20]. Серия экспериментов с двухмодульным ДВМГ позволила определить оптимальную конструкцию изоляторов передающей линии, дисковых модулей, металлических инертных вставок. Эскиз двухмодульного ДВМГ-250-2 в последнем эксперименте приведен на рис. 6.

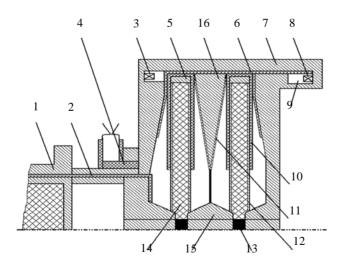


Рис. 6. Эскиз ДВМГ-250-2: 1 – предусилитель (СВМГ), 2, 6, 10, 11 – изолятор, 3 – первая группа измерительных датчиков, 4 – узел отключения СВМГ, 5 – металлическое кольцо, 7 – наружный токопровод, 8 – вторая группа измерительных датчиков, 9 – нагрузка, 12 – медный диск, 13 – электродетонатор, 14 – заряд ВВ, 15 – соединительный элемент, 16 – металлическая вставка

Каждый элемент генератора содержит заряд ВВ 14 на основе октогена (плотность  $\rho = 1,82$  г/см<sup>3</sup>, скорость детонации D = 8430 м/с). Торцы заряда облицованы медными дисками 12 толщиной 1 мм. Между дисковыми элементами установлена металлическая инертная вставка 16 из алюминия. Наружный токопровод 7 выполнен из меди. Инициирование зарядов ВВ осуществляется электродетонаторами 13. Начальная индуктивность одного элемента составляет  $\sim 6$  нГн. Дисковые элементы и металлическая вставка разделены лавсановыми изоляторами 10, 11. Электропрочность изоляторов составляет не менее 10 кВ. Изолятор передающей линии 6 обеспечивает электропрочность между дисками и наружным токопроводом 7.

В качестве предусилителя энергии использовался СВМГ диаметром 100 мм. К моменту замыкания контура ДВМГ ток в предусилителе составил  $I_{\text{feed}} = 6,1$  МА, максимальная производная тока  $2.6 \cdot 10^{11}$  A/c.

В нагрузке ДВМГ-250-2 с индуктивностью  $L_{load}=0,55$  нГн зарегистрирован импульс тока амплитудой 58,5 МА с максимальной скоростью нарастания  $1,4\cdot 10^{13}$  А/с и характерным временем  $\tau_e\sim 4\,$  мкс. Экспериментальная и расчетная зависимости производной тока ДВМГ приведены на рис. 7.

Расчетная кривая расположена несколько выше экспериментальной, нет особенности на производной вблизи максимума, спад расчетной производной после максимума не такой крутой, как в эксперименте. Расчетный ток ~ 60 MA.

В дальнейшем экспериментальная отработка проводилась с трехмодульным ДВМГ-250-3, т. е. в конструкцию генератора был добавлен один дисковый элемент и одна металлическая вставка. Суммарная индуктивная нагрузка генератора  $L_{\rm load}$  увеличена до 1,2 нГн. Все элементы были изготовлены из меди. Система изоляции – такая же, как в двухмодульном ДВМГ-250-2. В эксперименте в качестве предусилителя применялся СВМГ диаметром 160 мм с начальным током  $I_{\rm feed} = 4$  МА. В нагрузке с индуктивностью 1,2 нГн зарегистрирован импульс тока амплитудой 42 МА с максимальной скоростью нарастания  $9\cdot10^{12}$  А/с и характерным временем  $\tau_{\rm e}\sim4$  мкс. Расчетная и экспериментальная зависимости производной тока приведены на рис. 8.

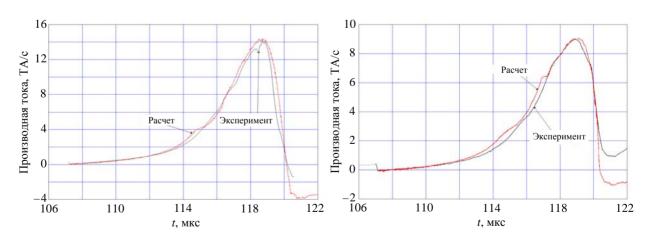


Рис. 7. Производная тока ДВМГ-250-2:  $L_{\mathrm{load}} = 0{,}55~\mathrm{н}\Gamma\mathrm{h},~I_{\mathrm{feed}} = 6{,}1~\mathrm{MA}$ 

Рис. 8. Производная тока ДВМГ-250-3:  $L_{\rm load} = 1,2$  нГн,  $I_{\rm feed} = 4$  МА

Следующий эксперимент с трехмодульным ДВМГ-250-3 был проведен при начальном токе  $I_{\text{feed}} = 5,1 \text{ MA}$  с индуктивной нагрузкой 1,7 нГн. Основные детали генератора изготовлены из меди, цилиндрический корпус стальной. Уменьшена толщина изоляции на дисковых модулях, металли-

ческие вставки и стенки генератора не изолировались. В нагрузке ДВМГ сформировал импульс тока амплитудой 36,6 MA с максимальной скоростью нарастания  $6.8 \cdot 10^{12}$  A/c и характерным временем  $\tau_e \sim 4$  мкс. Экспериментальные данные хорошо согласуются с расчетом. Расчетная и экспериментальная зависимости производной тока ДВМГ приведены на рис. 9.

Было выполнено численное моделирование работы трехмодульного ДВМГ-250-3 при начальном токе  $I_{\rm feed}$  = 6,5 MA. В расчетах принято, что корпус, металлические вставки, стенки ДВМГ изготовлены из меди, индуктивность нагрузки  $L_{\rm load}$  = 1,2 нГн. График производной тока приведен на рис. 10. Максимальный ток в расчете 65,5 MA, максимальная скорость нарастания тока в нагрузке 1,4·10<sup>13</sup> A/c, максимальная электромагнитная энергия 2,6 МДж.

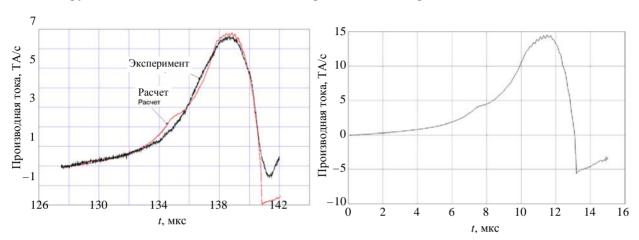


Рис. 9. Производная тока ДВМГ-250-3:  $L_{\rm load} = 1.7$  нГн,  $I_{\rm feed} = 5.1$  МА

Рис. 10. Производная тока ДВМГ-250-3:  $L_{\text{load}} = 1,2 \text{ н}\Gamma\text{H}, I_{\text{feed}} = 6,5 \text{ MA}$ 

С использованием полученных экспериментальных данных выполнен прогнозный расчет работы 30-модульного ДВМГ малого класса диаметром 250 мм при токе запитки  $I_{\text{feed}} = 7,0 \text{ MA}$ . В табл. 2 приведены экспериментальные данные и результаты расчетов работы ДВМГ-250, которые показывают возможность получения рекордного для ДВМГ диаметром 250 мм количества производимой магнитной энергии на 1 кг массы ВВ – около 0,95 МДж.

Таблица 2 Результаты испытаний и расчета ДВМГ-250 с плоскими модулями

Число модулей	2	3	3	3	30
$I_{\text{feed}}$ , MA	6,1	4,0	5,1	6,5	7,0
I <sub>load</sub> , MA	58,5	42,0	36,6	65,6	68,7
$\dot{I}_{\rm load}$ , MA/MKC	14,0	9,0	6,8	14,0	15,4
$L_0$ , н $\Gamma$ н	12,3	19,6	19,0	19,0	177,3
$L_{ m load}$ , н $\Gamma$ н	0,55	1,2	1,7	1,2	12,07
$E_{ m load}$ , МДж	0,94	1,1	1,4	2,6	29,6
те, мкс	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0
$m_{ m BB}$ , кг	1,8	2,7	2,7	2,7	27,0
BB	Эксп.	Эксп.	Эксп.	Расч.	Расч.

**ДВМГ среднего класса.** Отработка конструкции ДВМГ среднего класса диаметром 400 мм проводилась с экспериментальным блоком, содержащим один плоский дисковый модуль и боко-

вые профилированные фланцы [18]. Один из фланцев имеет тороидальную полость внешней нагрузки. На рис. 11 приведена схема блока, который состоит из следующих основных элементов: электродетонатора I, СВМГ 2 диаметром 160 мм, узла отключения 3, модуля ДВМГ 4, устройства подрыва 5, нагрузки 6. В модуле ДВМГ масса заряда ВВ 3,3 кг, что в 2 раза меньше, чем в дисковом элементе семейства «Поток». Ток запитки ДВМГ составляет  $I_{\text{feed}} = 6$ ,7 МА.

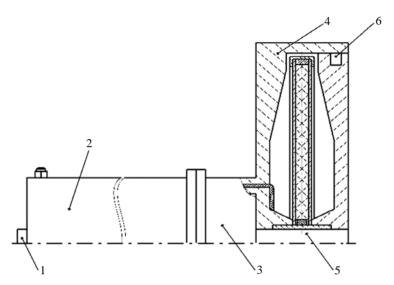


Рис. 11. Схема экспериментального блока с одномодульным ДВМГ-400-1

Экспериментальные зависимости производной тока и тока ДВМГ от времени приведены на рис. 12. В нагрузке ДВМГ-400-1 с индуктивностью 0,3 нГн зарегистрирован импульс тока амплитудой 118,1 МА с максимальной скоростью нарастания  $3.0\cdot10^{13}$  А/с и характерным временем  $\tau_e \approx 23.5$  мкс. Энергия в нагрузке достигла 3.22 МДж.

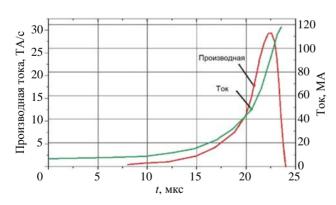


Рис. 12. Производная тока  $\dot{I}(t)$  и ток I(t) в одномодульном ДВМГ-400-1

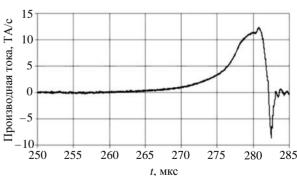


Рис. 13. Производная тока десятимодульного ДВМГ-400-10

Положительные результаты экспериментов явились основанием для разработки и испытания источника электромагнитной энергии на базе десятимодульного ДВМГ-400-10. Ожидалось, что в эксперименте предусилитель (СВМГ диаметром 400 мм) обеспечит ток запитки ДВМГ-400-10  $I_{\text{feed}} \sim 7,0$  МА. Однако на стадии работы СВМГ произошел пробой входного высоковольтного

изолятора в области узла отключения, так что ДВМГ-400-10 был запитан током 5,3 МА [19]. Кривая производной тока ДВМГ приведена на рис. 13. Результаты предварительного расчета работы ДВМГ-400-10 при токе запитки 7 МА и эксперимента приведены в табл. 3. Анализ показывает, что переход от профилированных модулей к плоским позволяет при сохранении энергетических характеристик ДВМГ диаметром 400 мм семейства «Поток» повысить КПД более чем в два раза – с 7 до 16 %.

Таблица 3 Результаты испытаний и расчета ДВМГ среднего класса с плоскими модулями

Число модулей	1	10	10
I <sub>feed</sub> , MA	6,7	5,3	7,0
I <sub>load</sub> , MA	118,1	76,0	120,0
$\dot{I}_{\rm load},~{\rm MA/mkc}$	29,7	12,0	32,4
$L_0$ , н $\Gamma$ н	12,7	131,2	127,3
$L_{ m load}$ , н $\Gamma$ н	0,3	4,70	3,8
$E_{ m load}$ , МДж	3,22	13,57	27,3
τ <sub>е</sub> , мкс	23,5	23,6	23,3
$m_{ m BB}$ , КГ	3,3	33,0	33,0
BB	Эксп.	Эксп.	Расч.

**ДВМГ большого класса.** Источники энергии на базе ДВМГ диаметром 1000 мм семейства «Поток» с профилированными дисковыми модулями — самые мощные в настоящее время источники, способные обеспечить в нагрузке электромагнитную энергию в сотни мегаджоулей [20]. Переход к плоским модулям позволяет снизить массу заряда в 1,8 раза и поднять КПД генератора с 8 до 20 %. Результаты испытаний и численного моделирования работы ДВМГ диаметром 1000 мм с плоскими модулями приведены в табл. 4 [16].

Таблица 4 Результаты испытаний и расчетов ДВМГ-1000 с плоскими модулями

Число модулей	8	8	1	1
I <sub>feed</sub> , MA	3,5	3,5	9,0	12,0
I <sub>load</sub> , MA	107,4	121,4	260,8	280,8
$\dot{I}_{\mathrm{load}},\ \mathrm{MA/mkc}$	8,9	10,1	17,1	19,4
$L_0$ , н $\Gamma$ н	275,5	275,5	35,0	35,0
$L_{ m load}$ , н $\Gamma$ н	5,4	5,4	0,89	1,08
E <sub>load</sub> , МДж	31,2	39,2	30,1	41,8
$\tau_{\rm e}$ , MKC	66,0	66,0	64,1	64,1
$m_{ m BB}$ , кг	248,0	248,0	31,0	31,0
BB	Эксп.	Эксп.	Эксп.	Расч.

### Заключение

Для решения различных проблем физики и техники высоких плотностей энергии, прежде всего в областях УТС [4] и физики твердого тела [21, 22], были разработаны сверхмощные быстродействующие взрывные генераторы электромагнитной энергии (ДВМГ), основанные на эффекте компрессии магнитного потока. ДВМГ способны производить импульсы тока с амплитудой сотни мегаампер и продолжительностью десятки микросекунд. Такие токи позволяют производить в индуктивной нагрузке импульсы электромагнитной энергии до сотен МДж — недосягаемой для других импульсных источников энергии величины. Так, самая мощная лабораторная установка Z (Sandia National Laboratories, США), питаемая конденсаторными батареями, производит волны высокого напряжения с продолжительностью на полувысоте первого колебания 100 нс и соответствующие импульсы тока в магнитоизолированной линии с амплитудой 26 МА, временем нарастания 100 нс и длительностью 200 нс, что позволяет получить в индуктивной нагрузке электромагнитную энергию 20 МДж [23], т. е. ниже, чем  $E_{\text{load}}$  в табл. 4. Ожидается, что при правильной запитке ДВМГ энергия в нагрузке  $E_{\text{load}}$  будет значительно увеличена [4].

Изначально для достижения необходимой высокой скорости сжатия магнитного потока дисковые модули соответственно профилировались. Профилирование, однако, требует сложной и дорогой технологии, а также много времени на изготовление. Замена дисковых профилированных модулей плоскими и профилирования дисков металлическими вставками с простой топологией, размещаемыми в полостях сжатия между смежными дисками, позволяет значительно уменьшать массу ВВ, увеличить эффективность преобразования энергии ВВ в электромагнитную энергию, упростить технологию изготовления модулей, снизить себестоимость производства в 3-4 раза и сократить время изготовления. Разработано и экспериментально отработано семейство ДВМГ с плоскими модулями, а именно ДВМГ малого (250 мм), среднего (400 мм) и большого (1000 мм) калибра с массой ВВ в модуле 0,9 кг/мод., 3,3 кг/мод. и 31 кг/мод., позволяющих производить энергию 1 МДж/мод., 3 МДж/мод. и 40 МДж/мод. соответственно. С такими ДВМГ выполнена серия экспериментов и численных расчетов. Несмотря на потери магнитного потока в металлических вставках, в экспериментах с ДВМГ с плоскими модулями достигнуто снижение массы ВВ и, соответственно, повышение эффективности преобразования энергии ВВ в электромагнитную энергию в 1,8-2 раза по сравнению с ДВМГ с профилированными дисками того же калибра. Использование плоских дисковых модулей открывает перспективы в проектировании многоцелевых ДВМГ любого калибра без предварительных экспериментальных испытаний.

Использование ДВМГ особенно перспективно для выполнения окончательных уникальных экспериментов в диапазоне энергий, недоступном для стационарных установок, после выполнения серии предварительных экспериментов на таких установках, в результате которых были бы разработаны соответствующие нагрузки (мишени)). Помимо области высоких плотностей энергии ДВМГ могут быть перспективны для проведения моделирующих экспериментов в области атмосферного электричества [24, 25].

### Список литературы

1. Fowler C. M., Garn W. B., Caird R. S. Production of very high magnetic fields by implosion // J. Appl. Phys. 1960. Vol. 31. P. 588–594.

- 2. Сахаров А. Д., Людаев Р. 3., Смирнов Е. И. и др. Магнитная кумуляция // ДАН СССР. 1965. Т. 165. С. 65–68.
- 3. Сахаров А. Д. Взрывомагнитные генераторы // УФН. 1966. Т. 88. С. 725-734.
- 4. Garanin S. G., Ivanovsky A. I., Mhitar'yan L. S. An ICF system based on Z-pinch radiation produced by an explosive magnetic generator // Nuclear Fusion. 2011. Vol. 51. P. 103010 [DOI: 10.1088/0029–5515/51/10/103010].
- 5. Bazanov A. A. Helical magnetocumulative generators with magnetic flux amplification: comparative advantages of amplification schemes and the operational efficiency of generators with dynamic transformation // Techn. Phys. 2011. Vol. 56. P. 1339–1344 [DOI: 10.1134/S1063784211090064].
- 6. Pak S. V., Babich L. P., Ivanovsky A. I. Fundamentals of electrodynamics technique of numerical designing of helical high-explosive magnetic generators // IEEE Trans. on Plasma Sci. 2015. Vol. 43. P. 2743–2753 [DOI: 10.1109/TPS.2015.2443378].
- 7. Chernyshev V. K., Protasov M. S., Shevtsov V. A. First disk explosive magnetic generators // Proc. of the 3<sup>rd</sup> Int. Conf. Megagauss Magn. Field Generat. Rel. Topics. Novosibirsk, 1983. P. 23–25.
- 8. Protasov M. S., Arkhipov B. V., Petrukhin A. A. et al. High-speed disk explosive magnetic generator // Ibid. P. 26-28.
- 9. Buyko A. M., Kudel'kin V. B., Kuzyayev A. I. et al. Effect of explosives parameters on the performance of a disc explosive magnetic generator // Abstr. 7<sup>th</sup> Int. Conf. Megagauss Magn. Field Generat. Rel. Topics. Novosibirsk, 2008. P. 55.
- 10. Чернышев А. К., Протасов М. С., Швецов В. А. и др. Генераторы семейства «Поток» / Вопросы атомной науки и техники. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1992. Вып. 4. С. 33–41.
- 11. Demidov V. A., Selemir V. D. Explosive pulsed power for controlled fusion // Proc. of the 11<sup>th</sup> Int. Conf. Megagauss Magn. Field Generat. Rel. Topics. London, 2006. P. 77–83.
- 12. Chernyshev V. K., Vakhrushev V. V., Kudel'kin V. B. Small class (250 mm) disk EMG testing result // Proc.  $13^{th}$  IEEE Int. Pulsed Power Conf. and  $28^{th}$  IEEE Int. Conf. Plasma Science. Las Vegas, Nevada, 2001. P. 971-973.
- 13. Demidov V. A., Selemir V. D. Explosive pulsed power for controlled fusion. Megagauss Magnetic Fields and High Energy Liner Technology / Eds. G. F. Kiuttu, P. J. Turchi, R. E. Reinovsky. Santa Fe, New Mexico, USA, 2007. P. 245–254.
- 14. Selemir V. D., Demidov V. A., Boriskin A. S. et al. Disk magnetocumulative generator of 480 mm diameter for explosive EMIR facility // Plasma Science. 2010. Vol. 38. P. 1762–1766.
- 15. Aryutkin M. Yu., Grinevich B. E., Egorychev B. T. et al. A family of disk EMG with flat disk elements // Proc. of Russian Federal Nuclear Center VNIIEF. In Russian, 2013. Vol. 18. P. 575–580.
- 16. Гриневич Б. Е., Дудай П. В., Ивановский А. В. и др. Дисковые взрывомагнитные генераторы энергии малого класса // Приклад. механика и техн. физика. 2015. № 1. С. 31–39.

- 17. Buyko A. M., Danov V. M., Mamyshev V. I., Yakubov V. B. Numerical calculation method for disk explosive magnetic generators (DEMGs) // Proc. of 7<sup>th</sup> Int. conf. Megagauss Magn. Field Generat. Rel. Topics. Sarov, 1997. P. 402–406.
- 18. Chernyshev V. K., Grinevich B. E., Vahrushev V. V., Mamyshev. Scaling Image of ~90 MJ explosive magnetic generators // Megagauss Fields and Pulsed Power Systems / Eds. V. M. Titov, G. A. Shvetsov. N.Y.: Nova Sci. Publ., 1990. P. 347–350.
- 19. Knoepfel H. Pulsed high magnetic fields. Amsterdam, London: Norton-Holland Publ. company, 1970.
- 20. Aryutkin V. Yu., Grinevich B. E., Ivanovsky A. V. et al. Experimental determination of limiting capabilities of small-class DEMG // Proc. of 13<sup>th</sup> Int. Conf. Megagauss Magn. Field Generat. Rel. Topics. Suzhou, 2010. P. 305–313.
- 21. Васюков В. А., Глыбин А. М., Дудай П. В. и др. Исследование реологических свойств алюминия с применением взрывомагнитных генераторов // Докл. АН. 2013. Т. 448. С. 285–288.
- 22. Kaul A. M., Ivanovsky A. V., Atchison W. L. et al. Damage growth and recollection in aluminum under axisymmetric convergence using a helical flux compression generator // J. Appl. Phys. 2014. Vol. 115. P. 023516.
- 23. Spielman R. I., Chantrenne S., McDaniel D. M. Limitations of laboratory pulsed power systems for multi-megagauss field generation // Proc. 11<sup>th</sup> Int. Conf. Megagauss Magn. Field Generat. Rel. Topics. London, 2006. P. 271–276.
- 24. Babich L. P., Boriskin A. S., Dimant E. et al. Simulation of direct effect of the lightning current with employing of a voltage multiplier created on the basis of transportable high explosive magneto-cumulative generator // Proc. of Int. Conf. on Lightning and Static Electricity. Toulouse (France), 1999, ICOLSE 1999-01-2319.
- 25. Selemir V. D., Demidov V. A. Pulsed power explosive generators for physical studies // Proc. 10<sup>th</sup> Int. Conf. Megagauss Magn. Field Generat. Rel. Topics. Berlin, 2005. P. 207–209.

# **Super-Power Disk Explosive Magnetic Generators**of Electromagnetic Energy for High-Energy Densities Research

V. B. Kudel'kin, L. P. Babich, B. E. Grinevich, A. V. Ivanovskiĭ, A. I. Kraev, E. V. Shapovalov

Multi-module disk explosive magnetic generators (DEMGs) of microsecond pulses of electromagnetic energy up to hundreds MJ, based on the internal explosive energy into electromagnetic energy conversion (magnetic flux compression), are reviewed. Fundamentals of the DEMG operation are outlined. Conventional DEMGs with intricate disk profile are described in short. A numerical technique of DEMG simulations is outlined. Special attention is given to the modernized DEMGs with flat modules of different caliber. At preservation of the output characteristics of the DEMGs with profile discs, the factor of the explosive to electromagnetic energy conversion of the DEMGs with flat discs is two-fold higher; such DEMGs achieve higher speeds, represent a technological advance and are less expensive.

# СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 5

Бабич Л. П.	
Грозовые нейтроны	242
Бабич Л. П.	
Наработка радиоуглерода грозами	274

# PAGE ELLAND

ЭЛЕКТРОФИЗИКА

УДК 533.9; 551.594

DOI: 10.53403.9785951504937 2020 25.1 242 273

## Грозовые нейтроны

Л. П. Бабич

Выполнен обзор современного состояния исследований грозовых ядерных реакций. Изложены результаты наблюдений усиления потока нейтронов в грозовых облаках и во время гроз. Усиление связывается с фотоядерными реакциями за счет тормозного излучения лавин убегающих электронов высоких энергий, развивающихся в грозовом электрическом поле. Отмечается трудность селекции грозовых нейтронов, обусловленная тем, что детекторы оказываются в смешанном поле различных излучений, включающем не только нейтроны, но и первичные электроны высоких энергий и их тормозное излучение. Особое внимание уделено открытию в грозовой атмосфере линии аннигиляции позитрона и электрона с энергией фотонов 0,511 МэВ, являющейся достоверным свидетельством генерации нейтронов и их фотоядерного происхождения. Обсуждаются следствия этого открытия.

### Введение

Проблема грозовых нейтронов относится к довольно новой, но уже имеющей почти вековую историю области геофизики - атмосферному электричеству высоких энергий. Новой, если судить по начавшемуся в 1980-х гг., медленному в 1990-х гг. и быстрому в новом тысячелетии росту числа публикаций о результатах экспериментальных и теоретических исследований высокоэнергетических процессов и явлений в грозовой атмосфере. Однако начало исследованиям в области атмосферного электричества высоких энергий было положено в конце первой четверти прошлого столетия публикацией двух гипотез шотландского физика и метеоролога Чарльза Вильсона (Charles Wilson) [1]. Широко известная в наше время гипотеза об ускорении («убегании» [2]) электронов до высоких энергий в электрических полях грозовых облаков доказана непосредственными наблюдениями ускоренных электронов и их тормозного излучения в рентгеновском и гамма-диапазонах [3-44]. Грозы производят интенсивные вспышки гамма-излучения длительностью до миллисекунды с энергиями фотонов до сотни МэВ [37]. Эти события, неожиданно обнаруженные в ближнем космосе Фишманом и др. [5] в начале 1990-х гг., сейчас известны как земные вспышки гамма-излучения (Terrestrial γ-ray Flashes – TGFs). Наблюдается тенденция зарождения TGFs в верхних областях грозовых облаков, что подтверждается их ассоцией с развивающимися вверх внутриоблачными разрядами [45, 46]. Другой вид эмиссии высоких энергий – так называемые гамма-свечения (у-ray glows [16, 17]), ассоциированные с процессами внутри грозовых облаков, т. е. импульсы рентгеновского и гамма-излучений длительностью от долей секунды до десятков минут, наблюдаются на земле, внутри или вблизи облаков с борта самолета и с воздушных шаров [3, 4, 6–8, 17, 20, 26–29, 31, 43].

<sup>©</sup> Nature. 2017. Vol. 551. P. 443; УФН. Т. 189, № 10. С. 1044–1069.

Ускорения первичных электронов по Вильсону оказалось недостаточно [47] для объяснения величин потоков грозового рентгеновского излучения, зарегистрированных уже в первых летных измерениях в грозовых облаках [3, 4]. Преодолеть это затруднение удалось после открытия процесса Гуревича — Милиха — Рюсселя-Дюпре [48], согласно которому первичные электроны высоких энергий, созданные в атмосфере космическим излучением, не только продолжают набирать энергию («убегать» [2]) в поле грозового облака, но в редких событиях ионизации с рождением вторичных электронов высоких энергий размножаются, формируя лавину релятивистских убегающих электронов (ЛРУЭ). Концепция ЛРУЭ усовершенствована включением релятивистской обратной связи, делающей возможным самоподдерживающееся развитие ЛРУЭ благодаря тому, что ее собственная вторичная эмиссия (рентгеновское и гамма-излучения, позитроны) создает затравочные центры, из которых развивается новая серия убегающих электронов высоких энергий [49, 50], подобно тому, как это происходит в процессе развития катодонаправленного стримера, поддерживаемого ионизацией газа перед его фронтом собственным излучением [51, 52].

Менее известно предсказание Вильсона о возможности ядерных реакций в грозовых облаках. Поскольку среди дочерних продуктов ядерных реакций часто оказываются нейтроны, обнаружение усиления потока нейтронов в грозовой атмосфере было бы прямым свидетельством протекания ядерных реакций. Попытки проверить первую идею Вильсона предпринимались с начала 1930-х гг. (см. обзор в [53]). Но хотя нейтрон был открыт примерно в то же время [54], вторая идея Вильсона оставалась вне внимания научного сообщества в течение десятилетий.

Только через полстолетия после публикации Вильсона Либби (Libby) и Лукенс (Lukens) оценили ожидаемый выход нейтронов из канала молнии [55] в связи с возможным вкладом грозовых нейтронов в производство изотопа углерода  $_6^{14}$ С, который широко используется для определения возраста археологических артефактов и произведений искусства. Поскольку естественная вода наряду с обычными молекулами  $H_2O$  содержит молекулы тяжелой воды  $D_2O$  (0,015 %) и HDO (0,03 %), Либби и Лукенс, исходя из представления о том, что в каналах молнии протекают реакции ядерного синтеза ( $^2H(^2H, n)^3$ He, энергия нейтронов 2,45 MэB), масштабируя результаты лабораторных экспериментов с электрическим взрывом полиэтиленовых нитей, обогащенных дейтерием, оценили выход как  $\approx 10^{16}$  нейтронов на один разряд молнии в канале объемом  $10 \text{ м}^3$ . Боле точная оценка понижает выход на два порядка [53]. В оценке Флейшера (Fleisher) с соавторами [56] выход нейтронов из канала молнии уменьшен до значения ниже  $10^{12}$ .

В первой попытке зарегистрировать грозовые нейтроны, предпринятой Флейшером в 1975 г., не получено никаких свидетельств об усилении потока нейтронов во время гроз [57]. Сообщение о первых успешных наблюдениях грозовых нейтронов было опубликовано только в первой половине 1980-х гг. [58]. С тех пор, хотя и после существенного временного разрыва (см. [59]), время от времени появляются сообщения о наблюдении усиления потока нейтронов в грозовых облаках, в частности во время гроз в корреляции с ЭМИ молнии.

Написание данной статьи мотивировано растущим интересом к генерации нейтронов грозами и необходимостью оценки состояния исследований в этой области физики атмосферного электричества высоких энергий, чтобы выяснить, является ли генерация нейтронов процессом, характерным для грозовой атмосферы, и обосновать в рамках последних наблюдений фотоядерное происхождение грозовых нейтронов, предсказанное только в 2006 г. [60]. С этой целью выполнен обзор наблюдений грозовых нейтронов. Отмечается трудность достоверной интерпретации полученных результатов. Особое внимание уделено результатам наблюдений Дуайера (Dwyer) [17] и Иното (Enoto) [44] с коллегами, которые, открыв грозовую гамма-линию позитронноэлектронной аннигиляции ( $e^+e^-$ ), получили надежные свидетельства генерации грозовых нейтронов и их фотоядерного происхождения. Обсуждаются следствия этого открытия. Обзор ограничивается доступными данными наблюдений; результаты теоретического анализа и численного моделирования упоминаются при необходимости.

### Наблюдения усиления потока нейтронов в грозовых облаках и во время гроз

После публикации статьи [58] в новом тысячелетии в основном публикуются сообщения о статистически значимых событиях усиления потока атмосферных нейтронов в грозовых облаках и во время гроз в различных областях Земли [29, 31–35, 38–40, 43, 59, 61–67]. Для регистрации нейтронов использовались нейтронные мониторы на основе борных (BF<sub>3</sub>) (реакция  $^{10}$ B(n,  $\alpha$ ,  $\gamma$ ) $^{7}$ Li) или гелиевых ( $^{3}$ He) счетчиков (реакция  $^{3}$ He(n, p)  $^{3}$ He). Из табл. 1 видно, что грозовые нейтроны регистрировались на различных широтах на уровне моря, в высокогорных условиях и ближнем космосе. Некоторые из этих событий имели миллисекундную длительность, как и TGFs, длительность других находится в области секунд и минут подобно гамма-свечениям.

В эксперименте [58] измерялось время задержки прихода нейтронов на детектор относительно ЭМИ. Эксперимент выполнялся с помощью не содержащего свинец нейтронного монитора (Lead-Free Gulmarg Neutron Monitor – LFGNM) Высокогорной научно-исследовательской лаборатории (Галмарг, Кашмир, Индия). Это область Гималаев на высоте 2743 м над уровнем моря с сильной грозовой активностью (в среднем 30 ударов молнии в день). Монитор включает 21 цилиндрический борный счетчик с полной площадью эффективной поверхности ≈3 м². Наблюдения выполнялись в течение трех лет до 1985 г.; зарегистрировано 11200 ЭМИ молнии, из которых 10818 коррелированны с одним зарегистрированным нейтроном, 250 − с двумя нейтронами и 124 − с тремя и более нейтронами (рис. 1, табл. 2). Авторы считают, что однонейтронные события обусловлены нейтронами, созданными космическим излучением, двухнейтронные события только частично обусловлены космическим излучением, но события с тремя и более зарегистрированными нейтронами следует полностью приписывать грозам.

Чаще всего встречаются многонейтронные события с малыми временами запаздывания, распределенными в диапазоне 10-50 мкс (см. рис. 1). Число таких событий 51. Исходя из того, что нейтроны генерируются в реакциях синтеза  $^2$ H( $^2$ H, n) $^3$ He в каналах молнии, по временам запаздывания и скорости нейтронов с энергией 2,45 МэВ полный выход нейтронов оценен как  $0.9 \cdot 10^7 - 2 \cdot 10^{10}$  на один удар молнии. Времена запаздывания остальных многонейтронных событий распределены в интервале между 60 мкс и  $2 \cdot 10^5$  мкс. Оцененные для них выходы нейтронов столь велики, что авторы считают их несовместимыми с физическими условиями в каналах молнии и полагают, что нейтроны в этих событиях генерируются многократными ударами, составляющими одну вспышку молнии. Первый удар вспышки инициировал систему регистрации, а нейтроны генерировались последующими ударами той же или другой вспышки. Не исключалось, что многонейтронные события с аномально большими временами запаздывания обусловлены нейтронами, излученными в направлениях от монитора, которые регистрировались только после относительно долгого блуждания в процессах многократного рассеяния в веществе с существенной деградацией по энергиям. В качестве объяснения этих событий авторы также упоминают реакции  $^{12}$ C( $^{2}$ H, n) $^{13}$ N и  $^{14}$ N( $^{2}$ H, n) $^{15}$ O как источники нейтронов более низких энергий.

Наблюдения грозовых нейтронов

				•	•			
Литера- тура	Время наблюдений	Страна, место	Высота над уровнем моря	Ассоциация	Число усилений скорости счета	Максимальное превышение скорости счета (м <sup>-2</sup> -мин <sup>-1</sup> )	Длительность усиления	Макс. кол-во нейтронов на событие
[61]		РФ	Ближний космос					
[65]	2008-2009	Индия	Малое поднятие	С молнией				
[62]	31.05.1998	РФ, Москва	Малое поднятие	С молнией				
[63]	2008-2009	Бразилия	610 м	С молнией		$10^{4}$	<2 мин	
[64, 65]	2009-2012	Якутск, Сибирь	94 м	С молнией	6	40 M <sup>-2</sup> ·c <sup>-1</sup>	3-2 мин	
[58]	Май 1980– май 1983	Индия, Галмарг,	., 647.6	СЭМИ	124			87
[67]	Май 2006— октябрь 2009	Гималаи	Z/45 M	молнии	150		1,28 мс	63
[31]	2000	Армения,	3250 м	С грозой	100	30	10 мин	1010
[32]	C 2003 I.	Арагатц				53	4 мин	
[59]	22.07.2010	Китай, Тибет	4300 м	С грозовым облаком	1		40 мин	
[38]	11.06-20.08.2010	Казахстан,	3340	3	25	$3.10^{4}$ *	1 мин	
[39, 40]	12.06-24.07.2013	Тянь-Шань	3.340 M	С молнией	68	$2.10^{7}$	0,2-542 мин	1000
[43]	05.01.2012	Япония, Японское море	Берег моря	С грозовым облаком	1	58	50 c	

 $^*$ Моя оценка  $1,3.10^5 \text{ м}^{-2}.$ мин  $^{-1}.$ 

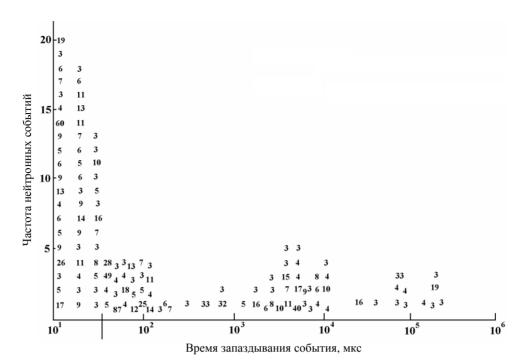


Рис. 1. Распределение времен запаздывания 124 коррелированных с ЭМИ молнии событий с тремя или более нейтронами; цифры дают количество составляющих событие нейтронов, зарегистрированных за время выборки 320 мкс [58]

Таблица 2 Время запаздывания нейтронов относительно ЭМИ молнии

Литература	Время наблюдений	Полное число нейтронных событий/полное число ЭМИ молнии	Время запаздывания, мкс	Число нейтронных событий	Максимальное число нейтронов в событии
[58]	Май 1980 – май 1983	124/11,200 n≥3	≈10-200	78	87
			$\approx 300-10^3$	4	32
			$\approx 10^3 - 10^4$	29	40
			Вблизи 10 <sup>5</sup>	12	33
[67]	Май 2006 – октябрь 2009	150/150 n≥3	1 - 300	9	52
			$6 \cdot 10^3 - 1,5 \cdot 10^4$	6	63
			$4 \cdot 10^5 - 2,3 \cdot 10^5$	5	19

Чтобы существенно снизить неизбежное влияние нейтронов, производимых космическим излучением, Шям (Shyam) и Кошик (Kaushik) выполнили поиск грозовых нейтронов на уровне моря [59]. Использована система регистрации нейтронов в Мумбаи (Mumbai), Индия, включающая 16 цилиндрических борных счетчиков, окруженных полиэтиленовым замедлителем. Наблюдалось сильное повышение скорости счета во времена вспышек молнии: 57,5 отсчетов за 100 мкс

на фоне 26,5 отсчетов при ясной погоде. Исходя из расстояния до высокой дымовой трубы с громоотводом, расположенной вблизи места наблюдений, которая притягивала удары молнии, авторы оценили максимальное число грозовых нейтронов как  $1,4\cdot10^9$  на удар. Предполагалось, что нейтроны генерировались той же реакцией  $^2H(^2H, n)^3He$  в коллективном ускорении или убегании ионов дейтерия в каналах молнии до высоких энергий, необходимых для эффективного ядерного синтеза.

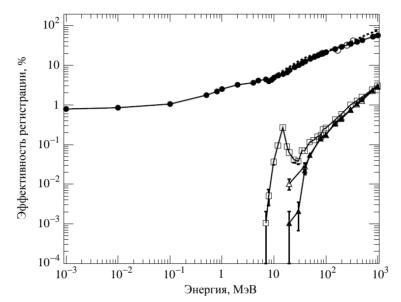
Кужевский [62], исходя из представления о том, что грозовые нейтроны рождаются в реакциях синтеза  ${}^2\mathrm{H}({}^2\mathrm{H},\,\mathrm{n})^3\mathrm{He}$  в каналах молнии, оценивает число нейтронов в импульсной короне молнии как  $10^9-10^{10}$  на один удар, что гораздо меньше оценки Либби и Лукенса [55] и даже оценки Флейшера и др. [56] Он сообщает о событиях с повышенной скоростью счета детектора нейтронов Московского государственного университета им. Ломоносова, неоднократно наблюдавшихся во времена гроз. В частности, 31 мая 1998 г. были зарегистрированы два события продолжительностью 10 секунд с повышением скорости счета до значения, приблизительно равного 180 1/с над уровнем фона, состоявшие из ряда более коротких импульсов.

Авторы статьи [61] полагают, что грозы отвечали за высокие потоки нейтронов, обнаруженные приборами с эффективными площадями 30 и 100 см² на борту спутника «Колибри-2000» с орбитой на высоте 350 км. Но, хотя числа нейтронов от высотных источников фотонов, уходящих до высоты орбиты спутника, превышают числа нейтронов от источников на низких высотах, достигающих уровня земли, флюенс нейтронов от высотных источников сильно уменьшается из-за пространственной дисперсии. Однако в статье [68] на основании вычисленного количества  $10^{12}$  фотоядерных нейтронов на одну вспышку ТGF численным моделированием их транспорта в ближний космос получен флюенс нейтронов  $\Phi_{\rm n} \approx 10^{-5}~{\rm cm}^{-2}$  на высоте 350 км для направленного вверх источника фотонов, расположенного на высотах  $15-20~{\rm km}$  под спутником, соответствующих данным наблюдений TGFs с борта спутников [69, 70]. Это значение  $\Phi_{\rm n}$  слишком мало для регистрации приборами с указанными выше площадями, поэтому в [68] выражаются сомнения в том, что отклики детекторов «Колибри-2000» [61] были обусловлены грозовыми нейтронами.

Мартин (Martin) и Альвес (Alves) [63] наблюдали атмосферные нейтроны посредством цилиндрического гелиевого счетчика с эффективной площадью 70 см², в котором отсутствовали как свинцовый продюсер, так и замедлитель нейтронов. Наблюдения велись с октября 2008 г. по август 2009 г. в городе São José dos Campos (Бразилия) на высоте 610 м над уровнем моря. Во время грозы 9 января 2009 г. была зарегистрирована вспышка нейтронов со скоростью счета 690 1/мин, что в 1000 раз выше средней скорости счета нейтронов до этого события. Продолжительность события составляла менее двух минут.

Группа Чилингаряна (Chilingarian) [31–35] ведет наблюдение космических лучей на Aragats Space Environmental Center (ArSEC) на высоте 3250 м над уровнем моря в Армении. Одновременно ведутся измерения гамма-излучения, нейтральных и заряженных частиц детекторами Space Environmental Viewing and Analysis Network (SEVAN) и Aragats Solar Neutron Telescope (ASNT). Дополнительно ведутся измерения нейтронов посредством Aragats Neutron Monitor (ArNM) типа NM64, включающим 18 борных счетчиков с эффективной площадью 18 м², расположенных под слоем свинца толщиной 5 см (поглотитель гамма-излучения) и слоем полиэтилена толщиной 10 см (замедлитель нейтронов). Впервые во времена грозовой активности одновременно измерены общие потоки высокоэнергетических электронов, мюонов, гамма-излучения и нейтронов. В частности, почти 100 событий повышенной скорости счета электронов, гамма-излучения и нейтронов, ассоциированных с грозами, наблюдались в течение 2003—2009 гг., включая 50 со-

бытий в минимуме солнечной активности в 2007-2009 гг., которые, по мнению авторов, имеют грозовое происхождение. Так, 19 сентября 2009 г., когда грозовые облака находились на высоте 100-200 м над ArSEC, было зарегистрировано большое повышение скорости счета монитора ArNM [31]. Разряд молнии, сопровождаемый осадками, наблюдался за полчаса до этого события. Зарегистрировано значительное превышение скорости счета ArNM над фоном (до  $53 \text{ м}^{-2} \cdot \text{мин}^{-1}$  с числом нейтронов 1010) продолжительностью 10 минут, что на 7 минут короче длительности повышения гамма-излучения (рис. 2).



Авторы [31] отмечают, что межпланетное магнитное поле 19 сентября 2009 г. было очень устойчивым, поэтому отсутствовал дополнительный поток космических лучей, который мог бы отвечать за усиление счета монитора ArNM. Следовательно, пик в одной минутной временной серии, зарегистрированной ArNM, доказывает, что наблюдалось усиление потока нейтронов в ArNM, несмотря на то, что оно  $(5,1\sigma)$  не является столь существенным, как регистрация нейтральных частиц детекторами ASNT  $(63\sigma)$  и SEVAN  $(23\sigma)$ . В этом событии электроны и гаммафотоны высоких энергий регистрировались одновременно с нейтронами. Наблюдение одновременного с нейтронами усиления потоков электронов и гаммафотонов с энергиями выше порога фотоядерных реакций  $\varepsilon_{th} = 10,55$  МэВ в воздухе рассматривается как однозначное подтверждение фотоядерного механизма генерации нейтронов и демонстрация того, что в атмосфере вблизи ArSEC развивалась ЛРУЭ.

В статье Цучия (Tsuchiya) и др. [29] сообщается о результатах наблюдений, которые велись посредством солнечного нейтронного телескопа (Solar Neutron Telescope – SNT) и нейтронного монитора (Yangbajing Neutron Monitor – YBJNM), установленных на высоте 4300 м над уровнем

моря в Обсерватории космических лучей (Yangbajing, Тибет, Китай). YBJNM состоит из 28 мониторов типа NM64. Каждый борный счетчик монитора — это труба длиной 190,8 см и радиусом 7,4 см, окруженная плитами полиэтилена толщиной 7,5 см и свинцовыми блоками со средней толщиной  $120~\rm r\cdot cm^{-2}$ . Площадь YBJNM  $32~\rm m^2$  — наибольшая среди международных нейтронных мониторов. Дополнительно для замедления нейтронов каждый счетчик помещен в полиэтиленовую трубу толщиной 2 см. Вычисленная эффективность монитора YBJNM регистрации нейтронов на порядок величины выше эффективности других проникающих излучений —  $\gamma$ -лучей, электронов и позитронов (см. рис. 2).

Во время дождливого сезона – с мая по октябрь 2010 г. – были зарегистрированы 25 событий ЭМИ молнии, поля которых сильно отличались от полей при ясной погоде [29]. Пять из них сопровождались длительным повышением скорости счета телескопа SNT и монитора YBJNM, продолжительность четырех из них – от 10 и свыше 30 минут. В одном случае, зарегистрированном 22 июля 2010 г., усиление длилось приблизительно 40 минут. Эти события намного длиннее событий, наблюдавшихся в зимних грозах на берегу Японского моря [26]. Авторы [29] полагают, что вероятной причиной различия является различие в циклах жизни зрелых стадий зимних и летних грозовых облаков. Телескопом SNT зарегистрированы существенные сигналы γ-излучения с энергиями фотонов выше 40 МэВ. Столь длительные высокоэнергетические события никогда прежде не наблюдались в ассоциации с грозовыми облаками или во время гроз. Они свидетельствуют о том, что ЛРУЭ с энергиями электронов, значительно превышающими 40 МэВ, способны развиваться в полях грозовых облаков в течение 40 минут.

Приняв во внимание, что в области высоких энергий спектры грозового у-излучения, зарегистрированного в ближнем космосе [37] и на уровне моря [26], подчиняются степенному закону с показателем –2,7 [37], близкому к 2,83 в работе [31], и –2 [26], а также учитывая, что теоретический спектр тормозного у-излучения является наиболее жестким с показателем –1, авторы [29] выполнили численное моделирование методом Монте-Карло транспорта гамма-излучения для источника со степенным спектром в диапазоне от 10 до 300 МэВ с тремя значениями показателя: -1, -2, -3. Известно, что в области высоких энергий общепринятый спектр тормозного излучения ЛРУЭ является экспоненциальным с характерной энергией 7 МэВ [70, 73, 74]. Возможно, причина разногласия с наблюдаемыми степенными спектрами состоит в том, что спектры электронов ЛРУЭ и их тормозного у-излучения вычислялись до установившегося состояния, тогда как наблюдаемые спектры, скорее всего, не успевали установиться. Используя удельное число фотоядерных нейтронов  $N_{\rm n1} = 4,3 \cdot 10^{-3}$  на один гамма-квант с энергией выше фотоядерного порога  $\varepsilon_{\rm th} =$ = 10,55 МэВ [75], для направленного вниз потока гамма-излучения с источником на высоте 900 м (5,2 км над уровнем моря), согласующейся с типичной высотой 1 км оснований летних грозовых облаков на Тибетском плато, авторы [29] оценивают флюенс грозовых нейтронов на уровне обсерватории в диапазоне энергий от 1 кэВ до 300 МэВ как  $\Phi_n \approx 1,4\cdot 10^4 \text{ м}^{-2}$ , т. е. в пределах предыдущих предсказаний  $(0.03-1)\cdot 10^4~\text{m}^{-2}$  [68] и  $10^3-10^7~\text{m}^{-2}$  [75, 76] для различных высот источника и детектора. Отсюда авторы заключают, что «фотоядерные реакции действительно протекают в зрелых стадиях грозовых облаков» [29].

В статьях группы Института космофизических исследований и аэрономии СО РАН [64–66] сообщается о результатах наблюдений генерации грозовых нейтронов на высоте 94 м над уровнем моря в долине Туймаада вблизи Якутска (Сибирь). Регистрация велась монитором 24NM64, помещенным в полиэтиленовый замедлитель и свинцовый продюсер. Во времена прохождения грозовых облаков над местом наблюдений зарегистрированы сильные вариации электрического поля на земле на 1-3 км ниже оснований облаков в течение 1-2 ч с амплитудами напряженности до

20 кB/м, что гораздо выше фона среднего поля в этом районе 100 B/м. В радиусе 10 км в окрестности пункта наблюдений были зарегистрированы 30 гроз за время наблюдений с 2009 по 2011 гг. Наблюдались потоки нейтронов  $40 \text{ м}^{-2} \cdot \text{c}^{-1}$  в течение 3-4 минут во время самых сильных девяти гроз с отрицательными разрядами молнии в событиях, когда напряженность электрического поля на земле превышала -16 кB/м, которая, по мнению авторов [64-66], является пороговой для генерации грозовых нейтронов.

Коллаборацией семи научных организаций Казахстана и России летом 2013 г. на Тянь-Шанской высокогорной станции космических лучей (3340 м над уровнем моря) во времена грозовой активности выполнены измерения проникающей радиации в рентгеновском и гамма-диапазонах (энергии от > 30 до > 300 кэВ) одновременно со вспышками нейтронов [39, 40]. Нейтроны измерялись в области тепловых энергий (≈0,025 эВ) пропорциональными гелиевыми счетчиками и в диапазоне ≥1 МэВ монитором 18NМ64 с расположенными в свинцовой трубе толщиной 10 см (поглотитель гамма-излучения) счетчиками с полиэтиленовым замедлителем нейтронов. Наблюдалась корреляция начала излучений со стартом разрядов молнии [40]. Так, в событии 13 июля 2013 г. счет тепловых нейтронов гелиевыми счетчиками запаздывал на 0,4 мс относительно начала разряда, а монитором нейтронов высоких энергий — на 0,08 мс; в событии 21 июля 2013 г. счет в обоих диапазонах начался на 0,08 мс до старта разряда (рис. 3). Гелиевыми счетчиками были зарегистрированы 40 событий с повышенной скоростью счета с максимальным числом нейтронов 47 в одном из них [40].

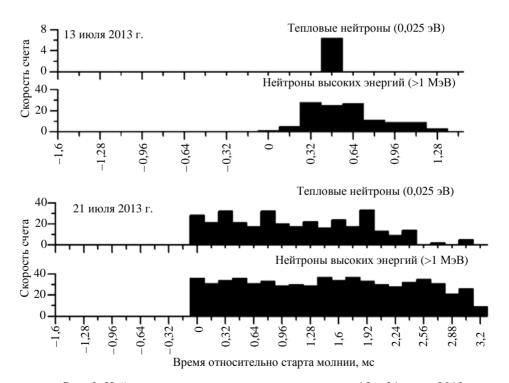


Рис. 3. Нейтронные сигналы, зарегистрированные 13 и 21 июля 2013 г. на Тянь-Шанской высокогорной станции космических лучей в событиях с близким ударом молнии, в окрестности момента старта молнии [39, 40]

В статье [39] описывается временная структура событий с повышенной скоростью счета нейтронов, коррелированной с ЭМИ разрядов молнии (см. рис. 3). Длительность повышений менялась в очень широких пределах: от 0,2 до 180 мс (гелиевый счетчик) и от 1 до 542 мс (монитор). Нейтроны излучались в основном вспышками длительностью  $\approx 200-400$  мкс. Интересно, что гамма- и электронные вспышки TGFs, длительность которых находится в миллисекундной области, также состоят из более коротких вспышек длительностью  $\approx 100$  мкс (например, [5, 18, 21, 22, 37]). Полный выход грозовых нейтронов оценивается как  $\approx 10^{10}$  нейтронов на разряд молнии [40]. Авторы [40] полагают, что измеренные значения скорости счета слишком велики и не могут объясняться «генерацией нейтронов фото- и электроядерными реакциями в электронно-фотонной лавине в атмосфере» и демонстрируют посредством численного моделирования методом Монте-Карло, что нейтроны генерировались, главным образом, в плотной среде (грунте) вокруг датчиков. Эта возможность упущена в работах [32, 77–81], где анализ выполнен в предположении, что грозовые нейтроны генерируются в воздухе или непосредственно в датчиках.

Много лет спустя эксперимент Шаха и др. [58] был повторен группой Иштиака (Ishtiaq) [67] на модернизированном мониторе LFGNM. За время наблюдений зарегистрировано 150 ЭМИ разрядов молнии (см. табл. 2). В каждом из них были обнаружены события с более чем двумя нейтронами. Например, в мае и июне 2006 г., когда грозовая активность в основном проходила вблизи LFGNM, ЭМИ разрядов молнии инициировали монитор 60 раз. Из этого числа в 50 случаях зарегистрировано более 4 нейтронов на событие (в статье [67] доступны наблюдательные данные только для 20 событий (см. табл. 2)).

В табл. 2 приведены: полное число событий с тремя и более нейтронами, коррелированными с ЭМИ молнии; общее полное число зарегистрированных ЭМИ; времена запаздывания, определенные как время между запуском монитора и регистрацией первого нейтрона; обнаруженное число нейтронных событий, коррелированных с ЭМИ, и максимальное число нейтронов в событии [58, 67]. Интересно, что времена запаздывания распределены в трех группах, которые довольно близки в обоих наблюдениях, причем число нейтронных событий уменьшается с увеличением времени запаздывания. Возможно, последнее есть свидетельство того, что источники таких событий находились на соответствующем удалении от монитора и, следовательно, поток нейтронов ослаблялся; в результате нейтроны далеких источников не достигали монитора. Уменьшение особенно заметно в наблюдениях Шаха и др. [68], где максимальное число нейтронов в событии также уменьшается с увеличением времени запаздывания. Возможно, это имеет место и в наблюдениях [67], если учесть все 150 событий.

Группой Куроды (Kuroda) [43] у атомной станции Оhi на побережье Японского моря зарегистрированы три вспышки гамма-излучения, связанные с зимними грозовыми облаками. Регистрация велась прототипом детектора антинейтрино PANDA, включающего 66 сцинтилляционных модулей размерами  $10\times10\times100$  см с покрытием, содержащим гадолиний с плотностью 4,9 мг/см². Излучение падало на детектор с направления, близкого к зениту, с максимальной скоростью счета  $550\pm10$  с $^{-1}$  в области энергий выше 3 МэВ. Нейтроны наблюдались синхронно с третьей гамма-вспышкой [43]. Для селекции нейтронов с высокой достоверностью использована техника запаздывающих совпадений. Попадавший в детектор нейтрон с высокой энергией отдавал ее часть протону отдачи в пластмассе (быстрое событие). После многократных столкновений нейтрон, в конце концов, захватывался ядром гадолиния, и в результате снятия возбуждения испускался  $\gamma$ -каскад с полной энергией 7,9 МэВ из  $^{157}$ Gd и 8,5 МэВ из  $^{155}$ Gd (запаздывающее событие), который регистрировался. По этим данным оценена максимальная скорость генерации нейтронов  $14\pm5$  с $^{-1}$  на единицу площади детектора (58 м $^{-2}$ ·мин $^{-1}$  в табл. 1) [43].

Согласно результатам численного моделирования методом Монте-Карло, выполненного в [43] в терминах ЛРУЭ [48], наблюдавшиеся гамма-спектры хорошо описываются тормозным излучением электронов с платоподобным распределением в области 14–20 МэВ, распространяющимися вниз с высоты 100 м. Но энергетическое распределение электронов ЛРУЭ в области высоких энергий является экспоненциальным независимо от напряженности электрического поля или плотности воздуха (например, [31, 82, 83]).

## Элементарный процесс, отвечающий за генерацию грозовых нейтронов

**Процессы с участием электронов высоких энергий и их тормозного излучения.** В первых сообщениях о наблюдении грозовых нейтронов в корреляции с разрядами молнии [58, 59, 62], как и в статье Либби и Лукенса [55], предполагалось, что генерация нейтронов связана с реакцией ядерного синтеза  ${}^{2}$ H( ${}^{2}$ H, n) ${}^{3}$ He, несмотря на скептическое отношение Флейшера (Fleisher) с соавторами [56] к возможности протекания этой реакции в плазме молнии, основанное на масштабировании данных генерирующих нейтроны лабораторных разрядов (см. Введение).

В статьях [77, 80] на основе концепции о ЛРУЭ выполнен анализ фундаментальных взаимодействий, которые могли бы отвечать за генерацию грозовых нейтронов, хотя в области высоких энергий характерные времена сильного, электромагнитного и слабого взаимодействий относятся как  $\tau_{\rm str}$ :  $\tau_{\rm el}$ :  $\tau_{\rm weak} \sim 10^{-14}$ :  $10^{-11}$ : 1, так что на первый взгляд может показаться, что доминирует сильное взаимодействие. Анализируются реакции ядерного синтеза, фотоядерные реакции и ядерные реакции, индуцированные электронами (реакция электродезинтеграции  $^{\rm n}_{\rm m} A({\rm e}^{-},{\rm n})^{\rm n-1}_{\rm m} A$  и реакция, обратная  $\beta$ -распаду  ${\rm e}^{-}({\rm p}^{+},{\rm n}){\rm v}_{\rm e}$  [84]), которые ранее [60, 75, 76, 85–90] не принимались во внимание, хотя вспышки жесткого гамма-излучения, наблюдавшиеся в корреляции с грозами, — только вторичное тормозное излучение электронов высоких энергий. Показано, что фотоядерные реакции доминируют в генерации грозовых нейтронов. В отличие от нулевого выхода нейтронов в ядерном синтезе ожидается существенный выход нейтронов в грозовой атмосфере за счет реакций электродезинтеграции, хотя и меньший выхода в фотоядерных реакциях. Оценки на основе сечения реакции  ${\rm e}^{-}({\rm p}^{+},{\rm n}){\rm v}_{\rm e}$ , полученного в работе Сриваставы (Srivastava) и др. [84], демонстрируют несущественный выход нейтронов в этой реакции.

Таким образом, за усиление потока нейтронов в грозовой атмосфере отвечают фотоядерные реакции и, в меньшей степени, реакции электродезинтеграции в результате развития ЛРУЭ в протяженных электрических полях грозовых облаков и локализованных полях разрядов молнии. Высокоэнергетические электроны, составляющие ЛРУЭ, размножаясь и взаимодействуя с атомарными частицами атмосферы, излучают тормозное излучение в рентгеновском и гамма-диапазонах. Как сказано во введении статьи, с начала 1980-х гг. эта эмиссия довольно часто регистрируется на поверхности Земли, с борта самолетов и с воздушных шаров, в ближнем космосе с борта искусственных спутников Земли. Измеренные спектры грозового гамма-излучения простираются до энергий фотонов  $\varepsilon_{\gamma}$ , соответствующих напряжениям в грозовых облаках и превышающих пороги фотоядерных реакций с главными компонентами атмосферы и твердой земной поверхности:  $\varepsilon_{\text{th,N}}(\gamma, \ln) \approx 10,55 \text{ МэВ}$ ,  $\varepsilon_{\text{th,O}}(\gamma, \ln) \approx 15,7 \text{ МэВ}$ ,  $\varepsilon_{\text{th,Ar}}(\gamma, \ln) \approx 9 \text{ МэВ}$ ,  $\varepsilon_{\text{th,Si}}(\gamma, \ln) \approx 10 \text{ МэВ}$ ,  $\varepsilon_{\text{th,Al}}(\gamma, \ln) \approx 8,5 \text{ МэВ}$ ,  $\varepsilon_{\text{th,Fe}}(\gamma, \ln) \approx 10 \text{ МэВ}$ . Именно электроны и  $\gamma$ -фотоны вторичного тормоз-

ного излучения высоких энергий способны выбивать нейтроны из ядер атмосферы ( $^{14}$  N,  $^{16}$  O,  $^{40}$  Ar), твердого вещества вокруг датчиков ( $^{27}$  Si,  $^{26}$  Al,  $^{56}$  Fe,  $^{16}$  O) и самих датчиков.

В этом смысле представительными являются данные о спектрально-временных параметрах TGFs, полученные по наблюдениям с борта спутника Итальянского космического агентства AGILE, оборудованного калориметром MCAL, способным регистрировать импульсные события в диапазоне энергий от 0,35 до 100 МэВ [37]. На рис. 4 показан обобщенный энергетический спектр 130 TGFs с исключенным фоном, наблюдавшихся с июня 2008 г. по январь 2010 г. Он простирается до энергии 100 МэВ и подчиняется степенному закону в области выше 10 МэВ, что не согласуется с моделями на основе ЛРУЭ, предсказывающими экспоненциальный спад при высоких энергиях. Этот спектр  $\sim \epsilon^{-(2,7\pm0,1)}$  в области выше  $\approx 7.5$  МэВ близок к спектру продолжительных гамма-свечений  $\sim \varepsilon^{-2,3}$ , наблюдавшихся на Арагаце на высоте 3250 м [31]. Такой гаммаспектр является серьезным аргументом в пользу фотоядерного происхождения грозовых нейтронов, поскольку простирается не только выше порогов производящих нейтроны фотоядерных реакций в азоте и кислороде, но намного выше положений 23,3 МэВ ( $^{14}$  N) и 22,7 МэВ ( $^{14}$  O) максимумов сечений этих реакций. Авторы статьи [37] заключают, что «высокоэнергетический хвост в области выше 10 МэВ оказывается не малой долей, близкой к 1 %, как предсказывается, например, в работе [68], но, скорее всего, составляет приблизительно 10 % от полной энергии» и предсказывают типичный выход нейтронов  $N_{\rm p} \ge 10^{13}$  в одной вспышке TGF, что на порядок величины превышает выход нейтронов 10<sup>12</sup>, предсказанный в работе [68] на основании результатов численного моделирования транспорта гамма-излучения, и приближает к другим предсказаниям: первым оценкам  $10^{15}$  для гигантского стратосферного разряда [60, 85, 86] и  $4 \cdot 10^{13}$  для внутриоблачного разряда молнии [86]; значениям  $1,6\cdot10^{14}-1,1\cdot10^{15}$ , полученным численным моделированием высотного разряда и его излучений [88]; ограничению снизу  $\geq 4 \cdot 10^{12}$  [75] на число нейтронов, вычисленное по скорости генерации тормозного излучения ЛРУЭ [73] и ограничению на область генерации гамма-излучения [88] с использованием удельного числа фотоядерных нейтронов  $N_{\rm nl} = 4,3 \cdot 10^{-3}$  на один гамма-квант с энергией выше фотоядерного порога  $\varepsilon_{\rm th} = 10,55~{\rm M}{\circ}{\rm B}.$ 

Первичные потоки  $\gamma$ -излучения в их источниках интенсивнее и энергии  $\gamma$ -фотонов  $\epsilon_{\gamma}$  выше, чем на датчиках. Поэтому генерация нейтронов в процессе транспорта гамма-излучения в атмосфере, твердой материи вокруг датчиков и в самих датчиках более эффективна, нежели можно предсказать на основе измеренных чисел  $\gamma$ -фотонов и их энергии. Даже если источники гамма-излучения находятся в каналах молнии, пробеги  $\gamma$ -фотонов с энергиями выше порогов фотоядерных реакций  $\epsilon_{\rm th}$  превышают поперечные размеры каналов молнии, так что нейтроны генерируются вне их объема. Зачастую продолжительность зарегистрированного гамма-импульса сильно превышает продолжительность разрядов молнии, достигая десятков секунд и минут; кроме того,  $\gamma$ -радиация часто завершается до разряда [4, 26–29, 31]. Гамма-импульсы могут только коррелировать с ЭМИ молнии; довольно часто они предшествуют им и даже не коррелируют с ними. Так, продолжительные гамма-свечения (до 40 минут), способные порождать нейтроны, наблюдались до ЭМИ разрядов молнии [26–29, 36], следовательно, не генерировались разрядами молнии. TGFs, зарегистрированные с борта спутников RHESSI [18] и Fermi Lab [21], наблюдались до, одновременно и после разрядов молнии (см., например, [12, 21, 22]). TGFs, зарегистрированные

с борта RHESSI, с длительностью обычно короче 1 мс наблюдались в пределах -3/+1 мс относительно ЭМИ молнии [12, 13].

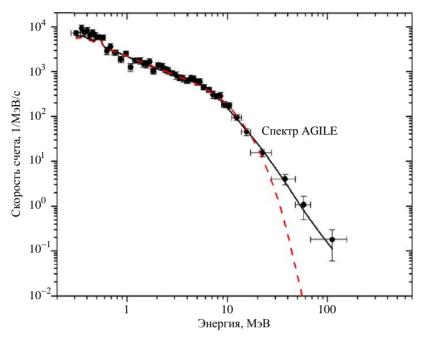


Рис. 4. Обобщенная спектральная скорость счета 130 вспышек TGFs, зарегистрированных с борта спутника AGILE, с исключенным фоном. Сплошная кривая — аппроксимация функциями  $f(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-(0,5\pm0,1)}$  в области энергий 1МэВ  $< \varepsilon < \varepsilon_c$  и  $f(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-(2,7\pm0,1)}$  в области  $\varepsilon_c < \varepsilon < 100$  МэВ , где  $\varepsilon_c = (7,5\pm0,5)$  МэВ; пунктирная кривая — феноменологическая модель до AGILE [18, 19, 80, 84]  $f(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-\alpha} \cdot \exp(-\varepsilon/\varepsilon_c)$ , где  $\alpha = 0,4\pm0,2$  и  $\varepsilon_c = 6,6\pm1,2$  МэВ [37]

Ядерный синтез? Хотя фотоядерное происхождение грозовых нейтронов является общепринятым, иногда выражаются сомнения [38] и продолжаются попытки связать усиление потока нейтронов в грозовой атмосфере с ядерным синтезом в каналах молнии [67, 90, 91]. Так, авторы статьи [38] полагают, что большой выход грозовых нейтронов тепловых энергий, якобы зарегистрированный ими в высокогорных условиях, «представляет серьезную трудность для фотоядерной модели генерации грозовых нейтронов». Позже для интерпретации результатов новых наблюдений [39, 40], в которых наряду с тепловыми нейтронами наблюдались грозовые нейтроны МэВ-диапазона, выполнено моделирование методом Монте-Карло в рамках фотоядерного и электродезинтеграционного механизма происхождения грозовых нейтронов [40]. Для обоснования результатов наблюдений [38] ядерным синтезом в канале молнии был развит механизм, основанный на убегании ионов дейтерия в сильных электрических полях, предположительно появляющихся в плазме молнии вследствие нарушения ее квазинейтральности [90], что, скорее всего, невозможно из-за высокой подвижности электронов [77, 80]. Пайва (Paiva) с соавторами [91] обсуждают механизм, обратный генерации грозовых нейтронов у-фотонами высоких энергий, а именно анализирует возможность того, что нейтроны, рожденные в реакциях ядерного синтеза  $^{2}$ H( $^{2}$ H, n) $^{3}$ He и  $^{2}$ H( $^{4}$ H, n) $^{4}$ He в каналах молнии, отвечают за вспышки гамма-излучения, наблюдаемые на земле. Название статьи [67] «Регистрация нейтронов с энергией 2,45 МэВ в корреляции с... разрядами молнии...» («Observation of 2.45 MeV neutrons correlated with... lightning discharges...») прямо указывает на то, что наблюдавшаяся авторами генерация нейтронов связывается с «...реакцией синтеза <sup>2</sup>H(<sup>2</sup>H, n)<sup>3</sup>He как одним из возможных механизмов генерации нейтронов, коррелированной с молнией». Это делается на основе единственного случая со временем запаздывания 14 мкс относительно ЭМИ молнии, ударившей в дерево, находящееся на расстоянии 300 м от монитора LFGNM; по этим данным энергия зарегистрированных нейтронов оценивается как ≈2,45 МэВ. Цучия, анализируя аномально большую скорость счета тепловых нейтронов, зарегистрированных гелиевым счетчиком, о которой сообщается в работе [38], также не исключает возможности некоторого вклада реакции <sup>2</sup>H(<sup>2</sup>H, n)<sup>3</sup>He в повышенную скорость счета [81].

Локализовать источник нейтронов прямыми наблюдениями — задача непростая даже в случаях, когда локализация источника представляется абсолютно очевидной. Так, Шах с соавторами [58] упоминают случай, когда молния ударила в дерево на расстоянии 1,5 км от монитора LFGNM. В результате зарегистрировано событие с 10 нейтронами и временем запаздывания 30 мкс (см. рис. 1). Расстояние, вычисленное в предположении энергии нейтронов 2,45 МэВ, оказывается почти в два раза меньше фактического расстояния до дерева, из чего следует, что энергия нейтронов могла быть выше. Авторы, однако, полагают, что наиболее вероятное объяснение состоит в том, что первый зарегистрированный нейтрон в этом событии был рожден космическим излучением, а последующие девять нейтронов генерировались молнией и были зарегистрированы после некоторого запаздывания. Наблюдалось событие, когда дерево, удаленное от монитора на 400 м, было повреждено молнией; в этом случае зарегистрированы 33 нейтрона (см. рис. 1). Расстояние согласуется со временем запаздывания этого события 71,74 мс при условии, что энергия нейтронов составляла всего 0,2 эВ. Расстояние до дерева, вычисленное в предположении энергии нейтронов 2,45 МэВ, на несколько порядков величины превышает фактическое расстояние [58].

В работах [60, 77, 80, 85, 86] на основе анализа реакций  $^2$ H( $^2$ H, n) $^3$ He,  $^2$ H( $^{14}$ N, n) $^{15}$ O,  $^2$ H( $^2$ C, n) $^{13}$ N показана неспособность ядерного синтеза отвечать за генерацию нейтронов в плазме молнии. При самых благоприятных условиях для ядерного синтеза в плазме молнии, сильно занижающих приведенную к давлению газа напряженность поля E/P, показано, что для рождения только одного нейтрона требуется очень сильное поле с приведенной напряженностью E/P > 55 - 174 MB/(м·атм.) для  $^2$ H( $^2$ H, n) $^3$ He и E/P > 44 - 152 MB/(м·атм.) для  $^2$ H( $^1$ 4N, n) $^{15}$ O. Эти значения E/P намного превышают не только приведенную напряженность пробивного поля в открытой атмосфере (E/P) $_{\rm br} \approx 3$  MB/(м·атм.) [51, 52], но даже значения E/P, которые создаются в воздушных промежутках сантиметрового диапазона при атмосферном давлении с использованием уникальных импульсов высокого напряжения с фронтами пикосекундного диапазона и амплитудами порядка сотен киловольт, позволяющими избежать пробоя и раннего коллапса напряжения, так что генерируются интенсивные пучки убегающих электронов высоких энергий (например, [53, 92–94] и цитируемая литература).

Являясь предельно консервативной относительно параметров плазмы и размеров каналов молнии, приведенная оценка E/P, выполненная в рамках предположений, благоприятных для реакций синтеза, показывает, что энергия дейтронов в плазме молнии ограничена реакциями перезарядки слишком малым значением, так что ядерный синтез в результате нагрева ионов электрическим полем в каналах молнии абсолютно невозможен в относительно медленных процессах разрядов молнии в такой плотной среде, как плотные слои нижней атмосферы. Это тем более верно, поскольку опущены все другие взаимодействия ионов дейтерия, прежде всего ударная ионизация и упругое рассеяние.

Наблюдения производства нейтронов лабораторными разрядами в открытой атмосфере. Завершая обсуждение возможности ядерного синтеза в плазме разрядов молнии, нельзя оставить без внимания наблюдение генерации нейтронов в экспериментах с длинными (≈1 м) разрядами в открытой атмосфере с использованием импульсов высокого напряжения длительностью ≈100 нс и амплитудами ≈1 МВ [95, 96]. Нейтроны наблюдались как одновременно с рентгеновскими импульсами [95] (см. рис. 5), так и с запаздыванием [96]. Поскольку энергия электронов и, следовательно, фотонов тормозного излучения не могла превышать 1 МэВ, т. е. была много ниже порога фотоядерных реакций в воздухе, то ядерный синтез остается единственным процессом, способным отвечать за генерацию нейтронов. Хотя из анализа экспериментальных данных, выполненного в статье [97] в рамках редакции экспериментов [95], сделан вывод о невозможности генерации нейтронов в этих экспериментах, результаты работ [95, 96], учитывая разнообразие методик и высокий уровень проведения измерений, остаются интригующими.

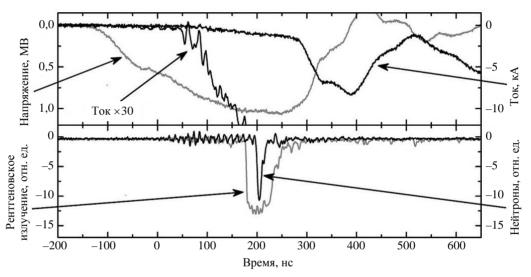


Рис. 5. Осциллограммы импульсов напряжения, тока, рентгеновского излучения и нейтронов [95]

# Трудность интерпретации наблюдательных данных по грозовым нейтронам

Фотоядерное происхождение грозовых нейтронов доказано численным моделированием [29, 31–33, 39, 40, 68, 75, 76, 79, 89], но прямые наблюдательные свидетельства ядерных реакций, генерирующих нейтроны во время гроз, отсутствовали. В некоторых экспериментах измерения выполнялись детекторами, покрытыми толстыми слоями свинца, поглощающими первичные грозовые электроны и тормозное гамма-излучение высоких энергий. В этом случае вместе с грозовыми нейтронами регистрируются фотоядерные нейтроны, произведенные в слоях свинца. В экспериментах с «голыми» детекторами предполагалось, что регистрируются только грозовые нейтроны, однако в этом случае вместе с нейтронами регистрируются первичные грозовые излучения.

В любом случае детекторы, традиционно используемые для измерений грозовых нейтронов, экранированы они или нет, не позволяют непосредственно на месте отделять их от первичной радиации, т. е. от электронов и гамма-излучения высоких энергий [29, 78, 79]. В используемых гелиевых (реакция  $^{3}$ He(n, p) $^{3}$ H) и борных (реакция  $^{10}$ B(n,  $\alpha$ ,  $\gamma$ ) $^{7}$ Li) счетчиках протоны, тритоны,  $\alpha$ -частицы,  $\gamma$ -фотоны и ядра лития ионизуют газ, создавая электрический импульс, который и регистрируется. Поскольку детекторы оказываются в смешанном поле электронов, гамма-излучения и нейтронов, требуется надежная селекция нейтронов.

Наш анализ [78, 79] регистрации «аномально высокого потока нейтронов низких энергий», о котором сообщается в работе [38], вызывает сильные сомнения в том, что наблюдавшиеся усиления скорости счета гелиевых счетчиков обусловлены нейтронами. Численным моделированием без априорных предположений с использованием только данных о редакции эксперимента [38] показано, что в [38], скорее всего, регистрировалось  $\gamma$ -излучение с энергиями фотонов  $\epsilon_{\gamma} > 1$  МэВ. С другой стороны, численное моделирование с учетом чувствительности детекторов к различным излучениям показывает, что все-таки регистрировались нейтроны [39, 40]. Однако анализ, выполненный Цучия с учетом спектральной чувствительности счетчика, доказывает способность счетчика, окруженного толстыми слоями вещества, регистрировать скорее грозовые  $\gamma$ -лучи, а не нейтроны [81]. Цучия заключает, что большое повышение скорости счета в работе [38] обусловлено  $\gamma$ -фотонами с энергиями  $\epsilon_{\gamma} > 10$  МэВ от близкого источника в грозовых облаках.

Моделирование методом Монте-Карло, выполненное в связи с наблюдениями за грозовыми излучениями высоких энергий в Обсерватории космических лучей (Yangbajing), показало, что  $\gamma$ -фотоны с энергиями выше 10 МэВ вносят значительный вклад в сигналы нейтронного монитора NM64, тогда как вклад фотоядерных нейтронов с энергиями выше 1 кэВ является относительно низким [29]. Отсюда следует, что повышение скорости счета нейтронных мониторов во время гроз не обязательно свидетельствует о генерации грозовых нейтронов. Априори неясно, обусловлены ли сигналы грозовыми нейтронами или являются следствием первичных  $\gamma$ -лучей. Так как потоки первичных электронов и  $\gamma$ -квантов высоких энергий интенсивнее потока дочерних нейтронов, а энергии электронов  $\epsilon_{\rm e}$  и фотонов  $\epsilon_{\gamma}$  намного превышают энергию нейтронов  $\epsilon_{\rm n} = \epsilon_{\gamma}$  (или  $\epsilon_{\rm e}$ ) –  $\epsilon_{\rm th}$ ( $\gamma$ , n), заслуживает внимания заключение о том, что не нейтроны, а  $\gamma$ -излучение может доминировать в регистрируемых нейтронными мониторами усилениях проникающих излучений во время гроз [29], несмотря на то, что эффективность регистрации нейтронов монитором NM64 выше эффективности регистрации  $\gamma$ -излучения (см. рис. 2).

# Грозовые позитроны; линия $e^+e^-$ аннигиляции как свидетельство грозовых нейтронов

Очевидно, интенсивные потоки грозового  $\gamma$ -излучения высоких энергий способны генерировать значительное количество позитронов, которые аннигилируют с электронами среды с эмиссией вблизи  $e^+e^-$ -линии 0,511 МэВ. Эти процессы, естественно, учитывались в численном моделировании ЛРУЭ и ТGF методом Монте-Карло [17, 29, 39, 43, 49, 50, 68, 73, 82, 98–103] начиная с первых работ [98–102]. В связи с пробоем на убегающих электронах [104] они анализируются в статье Гуревича и др. [105], где предсказывается возможность наблюдения  $e^+e^-$ -линии во время интенсивных разрядов в атмосфере. Такая возможность была достигнута в работах [17, 22, 44].

В статье [100] отмечается, что часть электронов, составляющих ЛРУЭ, может проникать в космос и давать, наряду с квантами тормозного излучения ЛРУЭ, вклад в показания приборов на борту спутников. Источник таких объединенных ТGF-подобных импульсов у-излучения и электронов находится высотах 14-15 км [106, 107]. Они наблюдались с борта спутника Fermi Lab, стартовавшего 11 июля 2008 г., посредством монитора вспышек у-излучения, состоявшего из 14 сцинтилляционных детекторов: 12 детекторов на основе кристаллов NaI(Tl), перекрывавших диапазон энергий приблизительно от 8 кэВ до 1 МэВ, и двух детекторов на основе висмут-германиевых кристаллов Bi<sub>4</sub>Ge<sub>3</sub>O<sub>12</sub>, перекрывавших диапазон приблизительно от 0,2 до 40 МэВ [22]. Длительность большинства таких TGF-подобных событий превышает 1 мс. Они обусловлены электронами высоких энергий, распространяющимися из источников вдоль линий геомагнитного поля. Анализ трех самых ярких событий показал, что их спектры включают интенсивные линии аннигиляции позитронов и электронов ( $e^+e^-$ ) с энергией 0,511 M<sub>2</sub>B, свидетельствующие о том, что электронные TGFs содержат существенный позитронный компонент (рис. 6), доля которого  $N(e^+)/(N(e^+)+N(e^-))$  оценивается в пределах 0,1-0,3 [22]. Авторы заключают, что пары рождаются в некоторых разрядах молнии и, скорее всего, все TGFs инжектируют электронно-позитронные пучки в космос.

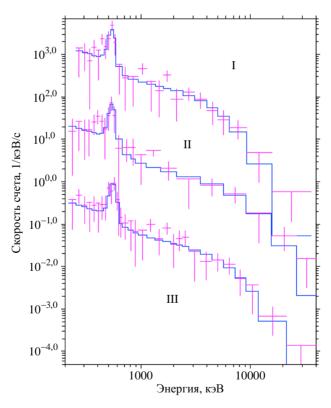


Рис. 6. Измеренная спектральная скорость счета (точки с ошибками) и подгонка численным моделированием (гистограммы) в событии I (7 августа 2008 г.) (увеличено в 50 раз), в событии II (13 августа 2009 г.) и в первом импульсе в событии III (14 декабря 2009 г.) (уменьшено в 50 раз), зарегистрированных с борта Fermi Lab [22]

**Наблюдение грозовой линии**  $e^+e^-$  **аннигиляции в грозовых облаках.** В августе-сентябре 2009 г. коллаборацией семи научных организаций США выполнены наблюдения с бортовым детектором излучений высоких энергий молнии (Airborne Detector for Energetic Lightning Emissions – ADELE), включающим детектор NaI(Tl) и пластмассовые сцинтилляторы BC 408. Зарегистрированы 21 гамма-свечение и 1 вспышка TGF, коррелированные с грозами [17, 20].

Крайне интересным для проблемы грозовых нейтронов является эпизод 21 августа 2009 г., когда во время прохождения области активной грозы зарегистрированы четыре гамма-свечения в диапазоне энергий  $0.3-1~{\rm MpB}$  и >1 MpB (рис. 7). Продолжительность наиболее яркого  $\gamma$ -свечения (скорость счета >10<sup>4</sup> 1/c в обоих энергетических диапазонах)  $\approx 5~{\rm c}$ . Авторы полагают, что в этом случае «ADELE вошла в нисходящий поток убегающих электронов, т. е. в область источника  $\gamma$ -свечения» [17]. Этому  $\gamma$ -свечению предшествовали более слабые и более короткие  $\gamma$ -свечения с длительностью  $\approx 0.2~{\rm c}$ . Два из них, обозначенных цифрами I и I на рис. I почти полностью обусловлены эмиссией в линию I и I новы обраст в изолированные облака аннигилирующих позитронов. В работе [17] выполнен анализ событий I и I и I события, обозначенные на рис. I цифрами I и I в анализе не учитывались, поскольку для них получены только грубые энергетические спектры в измерениях с пластмассовыми сцинтилляторами [17].

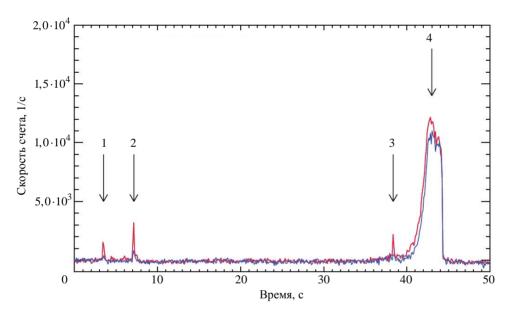


Рис. 7. Скорость счета бортового детектора излучений высоких энергий из молнии (ADELE) с исключенным фоном в диапазонах 0,3–1 МэВ (верхние пички) и >1 МэВ (нижние пички) [17]

На рис. 8 показаны объединенные энергетические спектры событий, обозначенных цифрами 1 и 3, полученные с помощью NaI(Tl)-детектора.

Спектры, вычисленные для различных расстояний от самолета до источника позитронов, сравниваются со спектром в событиях I и 3 [17]. Спектры, вычисленные с учетом только взаимодействия с самолетом и взаимодействия как с самолетом, так и с воздухом на длине 450 м, не согласуются с измеренным спектром. Спектры, вычисленные с большими исходными объемами воздуха (расстояния 900 и 2000 м), лучше согласуются с измеренным спектром, приблизительно

соответствуя линии 0,511 МэВ и низкоэнергетическому комптоновскому компоненту. Таким образом, авторы исключают локальный источник позитронов вблизи самолета и делают вывод, что наблюдаемое усиление обусловлено в основном линией 0,511 МэВ, порожденной в большом объеме воздуха в радиусе более 1 км от самолета. Поскольку время жизни позитрона в плотной атмосфере на порядок величины меньше 0,2 с, то должен существовать продолжительный источник позитронов.

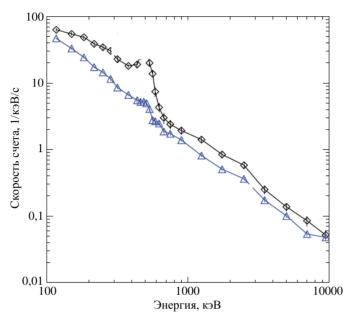


Рис. 8. Спектральная скорость счета ADELE в интервале времени 0-0.75 с до усиления  $\gamma$ -излучения ( $\Delta$ ), рассматриваемая как фоновая, и объединенная скорость счета двух усилений с энергией 0,511 МэВ, обозначенных цифрами 1 и 3 на рис. 7, зарегистрированная за время 0.8-0.9 с в пике этих усилений ( $\Diamond$ ) [17]

Наиболее вероятный источник позитронов связывается с локализованной областью повышенной радиоактивности в грозовом облаке, возможно, созданной высокоэнергетическими электронами ЛРУЭ и их тормозным излучением. Действительно, поскольку грозы могут порождать нейтроны в фотоядерных реакциях  $^{14}$ N( $\gamma$ , n) $^{13}$ N и  $^{16}$ O( $\gamma$ , n) $^{15}$ O, эти реакции, кроме нейтронов, производят довольно долгоживущие радиоактивные изотопы  $^{13}$ N (период полураспада  $\tau_{1/2}$ = 598 c) и  $^{15}$ O ( $\tau_{1/2}$ = 122 c), подверженные  $\beta^+$ -распадам  $^{13}$ N  $\rightarrow$   $^{13}$ C +  $e^+$  +  $\nu_e$  и  $^{15}$ O  $\rightarrow$   $^{15}$ N +  $e^+$  +  $\nu_e$ .

*Наблюдение грозовой линии*  $e^+e^-$  аннигиляции на земной поверхности. В 2017 г. коллаборацией GROWTH десяти японских научных организаций опубликованы давно ожидаемые надежные экспериментальные свидетельства того, что производящие нейтроны ядерные реакции протекают в грозовой атмосфере [44]. Наблюдения выполнялись зимой 2016—2017 гг. на побережье Японского моря на высоте 30-40 м над уровнем моря у атомной электростанции (Kashiwazaki-Kariwa, Niigita), там же, где наблюдались продолжительные вспышки грозового гаммаизлучения со спектром фотонов, простирающимся до 70 МэВ [26].

Использовались три детектора (A, B, C) с кристаллами  $Bi_4Ge_3O_{12}$  и один детектор (D) с кристаллом NaI(Tl). 6 февраля 2017 г. зарегистрированы два разряда молнии с грозового облака на поверхность моря на расстоянии 0.5-1.7 км от детекторов. За отрицательным разрядом с пиковым током -33 кА через 23,7 мкс последовал положительный разряд с током +44 кА. Все детекторы и 9 мониторов электростанции записали необычайно мощную TGF-подобную вспышку излучения длительностью менее 1 мс, которая сопровождалась гамма-послесвечением в результате захвата нейтронов (n,  $\gamma$ ) ядрами атмосферы и земной поверхности. Послесвечение на 2-3 порядка величиы превышало фон и затухло приблизительно за время 100 мс по экспоненте с постоянной времени 40-60 мс (рис. 9). Оно сопровождалось эмиссией вблизи  $\gamma$ -линии  $\epsilon_{\gamma} = 0.511$  МэВ, регистрируемой детекторами A и D в течение одной минуты (рис. 10, 11).

Обсуждая полученные результаты, Иното (Enoto) с коллегами, вслед за авторами [17], обращают внимание на то, что кроме нейтронов фотоядерные реакции производят нестабильные изотопы, которые за довольно продолжительное время в  $\beta^+$ -распадах трансформируются в устойчивые изотопы. Испускаемые позитроны аннигилируют с электронами атомарных частиц окружающей среды с эмиссией двух  $\gamma$ -фотонов с энергией 0,511 МэВ. Следовательно, чтобы экспериментально доказать, что фотоядерные реакции, генерирующие нейтроны, действительно, протекают во времена гроз, достаточно выделить эту  $\gamma$ -линию в широком спектре первичной эмиссии, что и наблюдалось в работе [44] и ранее в работе [17].

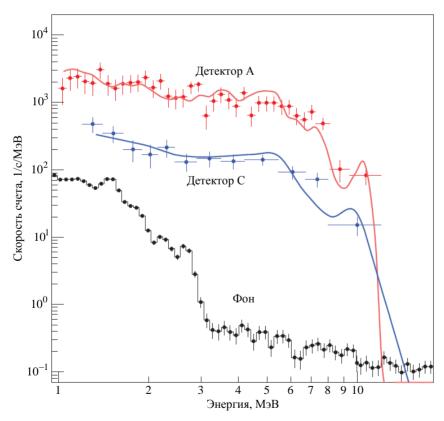


Рис. 9. Субсекундная спектральная скорость счета γ-девозбуждения ядер, зарегистрированного 6 февраля 2017 г. на берегу Японского моря [44]

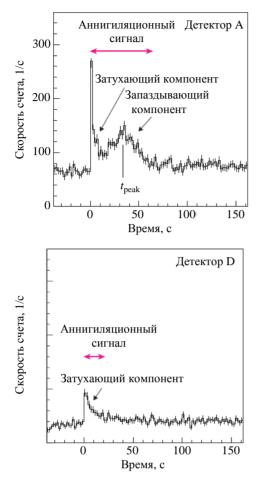


Рис. 10. Сигналы аннигиляции с детекторов А ( $Bi_4Ge_3O_{12}$ ) и D (NaI(Tl)), зарегистрированные 6 февраля 2017 г. на берегу Японского моря [44]

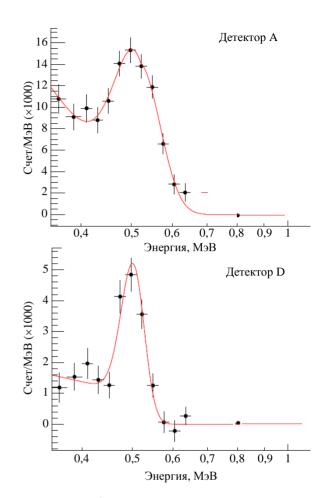


Рис. 11. Спектры сигналов аннигиляции на рис. 10 [44]

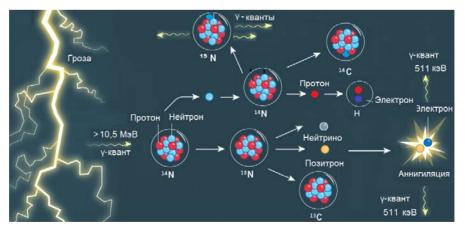


Рис. 12. Каналы реакций с участием ядер <sup>14</sup>N, инициируемых γ-квантом с энергией выше порога фотоядерных реакций [108]

Детекторы А и D регистрировали затухавший сигнал с характерным временем ≈5 с (затухающий компонент на рис. 10). Авторы [44] связывают этот сигнал с фотоядерными реакциями  $^{28}\mathrm{Si}(\gamma,\,\mathrm{n})^{27}\mathrm{Si}$  и  $^{27}\mathrm{Al}(\gamma,\,\mathrm{n})^{26}\mathrm{Al}$  в веществе вокруг детекторов, в самих детекторах и их корпусах, так как времена полураспада нестабильных изотопов  $^{27}$ Si  $(\tau_{1/2} = 4,15 \text{ c})$  и  $^{26}$ Al  $(\tau_{1/2} = 6,35 \text{ c})$  в реакциях  $^{27}$ Si ightarrow  $^{27}$ Al + e $^+$  +  $\nu_e$  и  $^{26}$ Al ightarrow  $^{26}$ Mg + e $^+$  +  $\nu_e$  согласуются с характерным временем 5 с. Напомним: в статье [39] указано, что нейтроны генерируются главным образом в твердом веществе вокруг детекторов и непосредственно в детекторах. Наряду с затухающим компонентом детектор А зарегистрировал запаздывающий компонент (см. рис. 10), который авторы [44] связывают с реакциями  $^{14}$  N $(\gamma, n)^{13}$  N и  $^{16}$  O $(\gamma, n)^{15}$  О в грозовом облаке. Их нестабильные продукты, изотопы азота  $^{13}$ N ( $\tau_{1/2} = 598$  с) и кислорода  $^{15}$ O ( $\tau_{1/2} = 122$  с), распадаются в реакциях  $^{13}$ N  $\rightarrow$   $^{13}$ C + e<sup>+</sup> +  $\nu_e$ и  $^{15}{
m O} 
ightarrow ^{15}{
m N} + {
m e}^+ + {
m v}_{\rm e}$ . Отсюда делается заключение, что запаздывающий компонент есть следствие аннигиляции в облаке, заполненном позитронами и переносимом ветром со скоростью  $v_{\rm wind} \approx 17$  м/с с характерным временем, совпадающим с положением максимума запаздывающего сигнала  $t_{\rm peak} = 34,5 \pm 1,0$  с (см. рис. 10), поскольку произведение  $v_{\rm wind}t_{\rm peak}$  сравнимо с расстоянием между детектором А и локализацией разрядов молнии [44]. Фактически реализована техника долгоживущих нейтронных индикаторов с использованием «детекторов» самой среды, а именно ядер атмосферы и твердого вещества, окружающего сцинтилляторы.

Как и авторы статьи [17], Иното с коллегами [44] не игнорируют возможность прямой генерации электронно-позитронных пар γ-излучением высоких энергий в процессе развития грозовой ЛРУЭ согласно [48, 49], но, как и авторы [17], подчеркивают, что аннигиляционные сигналы (см. рис. 10, 11) не сопровождались γ-излучением с энергиями фотонов выше 3 МэВ. Кроме того, отмечается, что во время аннигиляционных сигналов электрическое поле на земле было направлено вверх с напряженностью меньшей ≈3 кВ/м, поэтому позитроны, напрямую порождаемые тормозным излучением ЛРУЭ, не могли накапливаться вблизи поверхности земли, так что аннигиляционная линия не должна была усиливаться. На основании этих данных авторы [44] заключают, что фотоядерные реакции являются прямой интерпретацией наблюдаемых аннигиляционных сигналов.

На рис. 12 приведены каналы, начинающиеся реакцией  $^{14}$  N( $\gamma$ , n) $^{13}$  N. Каналы, начинающиеся реакциями  $^{16}$  O( $\gamma$ , n) $^{15}$  O,  $^{28}$  Si( $\gamma$ , n) $^{27}$  Si и  $^{27}$  Al( $\gamma$ , n) $^{26}$  Al, аналогичны.

- 1. Гамма-фотон с энергией выше фотоядерного порога  $\epsilon_{th}(\gamma,n)$  = 10,55 МэВ выбивает нейтрон из ядра  $^{14}$ N, в результате чего в конечном счете образуется ядро устойчивого изотопа  $^{13}$ C и излучаются два  $\gamma$ -фотона аннигиляции с  $\epsilon_{\gamma}$  = 0,511 МэВ.
- 2. Выбитый нейтрон захватывается ядром  $^{14}$ N; после снятия его возбуждения  $\gamma$ -излучением образуется ядро устойчивого изотопа  $^{15}$ N. Кроме того, возможно рождение ядра устойчивого изотопа  $^{17}$ O после захвата нейтрона ядром  $^{16}$ O и снятия возбуждения (не показано на рис. 12).
- 3. Выбитый нейтрон захватывается ядром  $^{14}$ N; после снятия его возбуждения эмиссией протона образуется ядро слабо радиоактивного изотопа радиоуглерода  $^{14}$ C (реакция  $^{14}$  N(n, p)  $^{14}$  C). Испускаемый протон захватывает свободный атмосферный электрон, и образуется атом водорода.

# Следствия открытия грозовой линии аннигиляции электрона и позитрона

- 1. Производящие нейтроны ядерные реакции действительно протекают в грозовой атмосфере в корреляции с разрядами молнии.
- 2. Как предсказывалось [60], грозовые нейтроны порождаются фотоядерными реакциями. Обнаружение линии  $\epsilon_{\gamma} = 0.511$  МэВ является достоверным свидетельством  $e^+e^-$  аннигиляции после разряда молнии и однозначным доказательством протекания в грозовой атмосфере производящих нейтроны фотоядерных реакций, поскольку линия  $\epsilon_{\gamma} = 0.511$  МэВ является следствием  $\beta^+$ -плюс распада их продуктов.
- 3. Подтверждается показанная в работах [60, 77–80, 85, 86] невозможность реакций ядерного синтеза в каналах: если бы ядерный синтез отвечал за рождение грозовых нейтронов, линия  $\epsilon_{\gamma} = 0,511 \text{ МэВ}$  отсутствовала бы и энергия фотонов в послесвечении была бы ограничена 2,45 МэВ, в то время как спектр послесвечения простирается выше 10 МэВ (см. рис. 9).
- 4. Иното с коллегами [44] обнаружен ранее неизвестный естественный источник изотопов в атмосфере, дополнительный к облучению Земли космическим излучением, таких как <sup>13</sup>N, <sup>15</sup>N, <sup>15</sup>O, <sup>17</sup>O, <sup>13</sup>C и <sup>14</sup>C, из которых последний широко используется в датировки археологических артефактов и художественных произведений. Действительно, вклад гроз в содержание изотопа <sup>14</sup>C на Земле может быть сопоставим с наработкой космическим облучением в некоторых областях Земли [109]. Учитывая значение проблемы, требуются более точные и многочисленные экспериментальные исследования грозовых вспышек гамма-излучения и нейтронов на разных высотах, долготах, широтах.
- 5. Инициируемые грозами ядерные реакции, возможно, протекают в атмосферах других планет, таких как Юпитер, Сатурн или Венера, поэтому могут давать вклад в изотопный состав их атмосфер [62, 110]. Определение величины этого вклада потребует детальных исследований грозовых вспышек гамма-излучения и нейтронов на этих планетах.
- 6. Открытие, сделанное в результате наблюдений [17] и [44], подтверждает мнение о том, что грозовые нейтроны генерируются не в каналах молнии, поскольку даже полные пробеги  $\gamma$ -фотонов (а тем более их пробеги в фотоядерных реакциях) с энергиями выше фотоядерного порога  $\varepsilon_{th}(\gamma, n)$  на порядки величины превосходят поперечные размеры каналов [77–80, 108]. Следовательно, вопреки ожиданиям [53, 56], грозовые нейтроны не являются информативными о параметрах плазмы разрядов молнии, но, тем не менее, могут поставлять информацию о процессах в грозовой атмосфере, поскольку генерируются не только в твердом веществе на земле, но и в грозовых облаках (спектр на рис. 8 [17] и запаздывающая линия аннигиляции на рис. 10 [44]).

### Заключение

Исследования высокоэнергетических процессов в грозовых облаках и во время гроз, инициированные почти сто лет назад Чарльзом Вильсоном [1], остаются новой и слабо разработанной областью физики атмосферного электричества. Хотя число наблюдений грозовых импульсов рентгеновского излучения, гамма-излучения и нейтронов ограниченно, твердо установлено, что высокоэнергетические процессы характерны для земных грозовых облаков и гроз и являются следствием лавинообразного размножения электронов высоких энергий [48] в крупномасштабных полях грозовых облаков, как предсказывал Вильсон [1], или в пространственно ограниченных электрических полях лидеров молнии (например, [53, 111, 112] и цитируемая литература). Поскольку наэлектризованные облака и разряды молнии наблюдаются в атмосферах других планет Солнечной системы, а убегающие электроны и их тормозное излучение регистрируются при электрических разрядах не только в воздухе, но и в других газообразных средах (например, [53, 113, 114] и цитируемая литература), высокоэнергетические явления, скорее всего, также характерны для других планетарных атмосфер [62, 110].

Несмотря на существенный успех, достигнутый со времен Вильсона, особенно в течение последних десятилетий, о грозовых высокоэнергетических процессах известно немного. Среди них особенно слабо изучены ядерные реакции, в том числе порождающие нейтроны. К настоящему времени опубликовано совсем немного статей, в которых сообщается о наблюдениях грозовых нейтронов; еще меньше сообщений об измерениях числа нейтронов, так что эта величина остается довольно неопределенной. Сейчас даже неясно, генерируются ли нейтроны каждым грозовым облаком и каждой грозой. Так, в первом сообщении об открытии грозовых нейтронов в Гималаях [58] были отобраны только 124 события генерации грозовых нейтронов на фоне 11200 ЭМИ молнии. Позже там же наблюдались грозовые нейтроны, коррелированные почти с каждым зарегистрированным ЭМИ [67]. Согласно обширному числу наблюдательных данных, полученных на горе Арагац с 2009 г., гамма-фотоны с энергиями выше порога фотоядерных реакций в атмосфере є<sub>th.N</sub> = 10,55 МэВ генерируются каждой грозой [31–35].

Реакции ядерного синтеза в канал молнии, с которыми связывались ожидаемые, а затем и первоначально наблюдаемые усиления потока нейтронов во время гроз, невозможны при известных параметрах разрядов молнии и современных представлениях о макроскопических и элементарных процессах, гипотетически способных протекать в плазме молнии. Поскольку гамма-излучение с энергиями фотонов, превышающими фотоядерный порог, генерируется в грозовой атмосфере, происхождение грозовых нейтронов принято связывать с фотоядерными реакциями и, в меньшей степени, с реакциями электродезинтеграции, инициируемыми грозовыми вспышками электронов высоких энергий и их тормозного гамма-излучения. Фотоядерная природа грозовых нейтронов доказана численным моделированием. Однако ввиду трудности селекции нейтронов от других проникающих излучений, таких как электроны и гамма-фотоны высоких энергий, длительное время отсутствовали достоверные наблюдательные свидетельства генерации нейтронов в грозовой атмосфере и их происхождения. Грозовые фотоядерные реакции не наблюдались прямо, несмотря на растущее число наблюдательных свидетельств о нейтронах, предположительно обусловленных этими реакциями. Чтобы исключить эффект электронов и γ-излучения, требовалось критичесое наблюдение («ехрегіmentum cruces» по Бэкону).

Окончательные свидетельства протекания таких реакций были получены только недавно в работе Иното с коллегами, которые, вслед за предсказанием Гуревича и др. возможности во время пробоя на убегающих электронах в грозовых электрических полях наблюдать грозовую  $\gamma$ -линию  $e^+e^-$  аннигиляции с энергией 0,511 МэВ [105] и наблюдениями этой линии в грозовом облаке группой Дуайера [17], обнаружили на уровне моря запаздывающую линию  $e^+e^-$  аннигиляции и для объяснения ее происхождения учли, как и в [17], другие, помимо нейтронов, продукты фотоядерных реакций, а именно нестабильные ядра компонентов воздуха и твердого вещества самих детекторов и их окружения. Позитроны, испускаемые этими ядрами, аннигилируют; возникающая линия  $e^+e^-$  аннигиляции является прямым свидетельством грозовых нейтронов и их фотоядерного происхождения.

Порождающие нейтроны грозовые реакции протекают вне каналов молнии, следовательно, грозовые нейтроны не позволяют заглянуть внутрь каналов и получить информацию о плазме разрядов молнии. Тем не менее они могут поставлять информацию о процессах в грозовой атмосфере. Открытие линии е<sup>+</sup>е<sup>-</sup> аннигиляции доказывает, что грозовая атмосфера генерирует гаммарадиацию с энергиями фотонов выше фотоядерного порога в воздухе 10,55 МэВ и является сильным аргументом в пользу процесса Гуревича – Милиха – Рюсселя-Дюпре [48], лежащего в основе многих аспектов атмосферного электричества высоких энергий. Дальнейшие поиски грозовых нейтронов с более детальным исследованием их временных, пространственных и энергетических характеристик способны пролить свет на многие проблемы атмосферного электричества. Крайне многообещающим является то, что с обнаружением этой вторичной γ-линии открывается «новый путь к изучению ТGFs, которые довольно редки.., поскольку датчики на воздушных шарах или на борту самолетов способны измерять TGF-сигнатуры только после завершения TGF» [17].

## Благодарности

Исследования атмосферного электричества высоких энергий во ВНИИЭФ являются продолжением пионерских исследований высокоэнергетических процессов в лабораторных разрядах в открытой атмосфере, начатых в конце 1960-х гг. группами Л. В. Тарасовой и Ю. Л. Станкевича, сотрудничество с которыми в качестве аспиранта и молодого специалиста автор вспоминает с глубокой благодарностью.

Данная статья явилась продолжением исследований, выполненных по проектам МНТЦ № 339, 490, 1480 и 3993. Автор выражает глубокую благодарность бывшему научному советнику МНТЦ от США S. Gitomer, коллабораторам от США и ЕС в этих проектах R. A. Roussel-Dupré, E. M. D. Symbalisty, C. Haldoupis, T. Neubert, а также N. Crosby, S. Cummer, A. van Deursen, J. R. Dwyer, R. Roussel-Dupré, D. Smith, H. Tsuchiya и Е. Williams за поддержку предложения по последнему в программе МНТЦ проекту № 3993. Автор искренне благодарен Е. Н. Донскому, А. В. Гуревичу, К. П. Зыбину, И. М. Куцыку, Т. В. Лойко, С. Haldoupis, Т. Neubert, R. A. Roussel-Dupré, Е. М. D. Symbalisty и другим участникам исследований за многолетнее сотрудничество.

Особую благодарность автор выражает Р. И. Илькаеву за оказанную поддержку исследований по атмосферному электричеству высоких энергий.

## Список литературы

- 1. Wilson C. The Acceleration of  $\beta$ -particles in strong electric fields such as those of thunderclouds // Proc. Cambridge Phil. Soc. 1924. Vol. 22. P. 534–538.
- 2. Eddington A. S. The origin of stellar energy // Supplement to Nature. 1926. Vol. 2948. P. 25.
- 3. Parks G. K., Mauk B. H., Spiger R., Chin J. X-ray enhancements detected during thunderstorm and lightning activities // Geophys. Res. Lett. 1981. Vol. 8. P. 1176–1179.
- 4. McCarthy M., Parks G. K. Further observations of X-rays inside thunderstorms // Ibid. 1985. Vol. 12. P. 393–396.
- 5. Fishman G. J., Bhat P. N., Mallozzi R. et al. Discovery of intense gamma-ray flashes of atmospheric origin // Science. 1994. Vol. 264. P. 1313–1316.

- 6. Eack K. B., Beasley, W. H., Rust W. D. et al. Initial results from simultaneous observation of X-rays and electric fields in a thunderstorm // J. of Geophys. Res. 1996. Vol. 101(D23). P. 29637–29640.
- 7. Eack K. B., Beasley W. H., Rust W. D. et al. X-ray pulses observed above a mesoscale convective system // Geophys. Res. Lett. 1996. Vol. 23(21). P. 2915–2918.
- 8. Eack K. B., Suszcynsky D. M., Beasley W. H. et al. Gamma-ray emission observed in a thunderstorm anvil // Ibid. 2000. Vol. 27. P. 185–188.
- 9. Chubenko A. P., Antonova V. P., Kryukov S. Yu. et al. Intense X-ray emission bursts during thunderstorms // Phys. Lett. A. 2000. Vol. 275. P. 90–100.
- 10. Chubenko A. P., Amurina I. V., Antonova V. P. et al. Effective growth of a number of cosmic ray electrons inside thundercloud // Phys. Lett. A. 2009. Vol. 309. P. 90–102.
- 11. Alexeenko V. V., Khaerdinov N. S., Lidvansky A. S., Petkov V. B. Transient variations of secondary cosmic rays due to atmospheric electric field and evidence for pre-lightning particle acceleration // Phys. Lett. A. 2002. Vol. 301. P. 299–306.
- 12. Cummer S. A., Zhai Y., Hu W. et al. Measurements and implications of the relationship between lightning and terrestrial gamma-ray flashes // Geophys. Res. Lett. 2005. Vol. 32. P. L08811 [DOI:10.1029/2005GL022778].
- 13. Cummer S. A., Lu G., Briggs M. S. et al. The lightning-TGF relationship on microsecond timescales. // Ibid. 2011. Vol. 38. P. L14810 [DOI:10.1029/2011GL048099].
- 14. Dwyer J. R. Source mechanisms of terrestrial gamma-ray flashes // J. Geophys. Res. 2008. Vol. 113. P. D10103 [DOI:101029/2007JD009248].
- 15. Dwyer J. R., Grefenstette B. W., Smith D. M. High-energy electron beams launched into space by thunderstorms // Geophys. Res. Lett. 2008. Vol. 35. P. L02815 [DOI:101029/2007GL032430].
- 16. Dwyer J. R., Smith D. M., Cummer S. A. High energy atmospheric physics: terrestrial gamma-ray flashes and related phenomena // Space Sci. Rev. 2012 [DOI:101007/s11214-012-9894-0].
- 17. Dwyer J. R., Smith D. M., Hazelton B. J. et al. Positron clouds within thunderstorms // J. Plasma Phys. 2015. Vol. 81. 475810405 [DOI:101017/S0022377815000549].
- 18. Smith D. M., Lopez L. I., Lin R. P., Barrington-Leigh C. P. Terrestrial gamma-ray flashes observed up to 20 MeV // Science. 2005. Vol. 307. N D4. P. 1085 1088.
- 19. Grefenstette B. W., Smith D. M., Dwyer J. R., Fishman G. J. Time evolution of terrestrial gamma-ray flashes // Geophys. Res. Lett. 2007. Vol. 35. P. L06802 [DOI:10.1029/2007GL032922].
- 20. Smith D. M., Dwyer J. R., Hazelton B. J. et al. A terrestrial gamma-ray flash observed from an aircraft // J. of Geophys. Res. 2011. Vol. 116. P. D20124 [DOI:10.1029/2011JD016252].
- 21. Briggs M. S., Fishman G. J., Connaughton V. et al. First results on terrestrial gamma-ray flashes from the Fermi gamma-ray burst monitor // Ibid. 2010. Vol. 115. A07323 [DOI:10.1029/2009JA015242].
- 22. Briggs M. S., Connaughton V., Wilson-Hodge C. et al. Electron-positron beams from terrestrial lightning observed with Fermi GBM // Geophys. Res. Lett. 2011. Vol. 38(2). P. L02808 [DOI:10.1029/2010GL046259].

- 23. Marisaldi M., Fuschino F., Labanti C. et al. Detection of terrestrial gamma-ray flashes up to 40 MeV by the AGILE satellite // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A00E13 [DOI:101029/2009JA014502].
- 24. Marisaldi M., Argan A., Trois A. et al. Gamma-ray localization of terrestrial gamma-ray flashes // Phys. Rev. Lett. 2010. Vol. 105. P. 128501 [DOI:10.1103/PhysRevLett105].
- 25. Connaughton V., Briggs M. S., Holzworth R. H. et al. Associations between Fermi gamma-ray burst monitor terrestrial gamma-ray flashes and sferics from the World Wide Lightning Location Network // J. of Geophys. Res. 2011. Vol. 115. P. A12307 [DOI:10.1029/2010JA015681].
- 26. Tsuchiya H., Enoto T., Yamada S. et al. Detection of high-energy gamma-rays from winter thunder-clouds // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. P. 165002.
- 27. Tsuchiya H., Enoto T., Torii T. et al. Observation of an energetic radiation burst from mountain-top thunderclouds // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. P. 255003 [DOI:10.1103/PhysRevLett.102.255003].
- 28. Tsuchiya H., Enoto T., Yamada S. et al. Long-duration  $\gamma$ -ray emissions from 2007 and 2008 winter thunderstorms // J. of Geophys. Res. 2011. Vol. 116. P. D09113 [DOI: 10.1029/2010JD015161].
- 29. Tsuchiya H., Hibino K., Kawata K. et al. Observation of thundercloud-related gamma rays and neutrons in Tibet // Phys. Rev. D. 2012. Vol. 85. P. 092006.
- 30. Moore C. B., Eack K. B., Aulich G. D., Rison W. Energetic radiation associated with lightning stepped-leaders // Geophys. Res. Lett. 2001. Vol. 28. P. 2141–2144.
- 31. Chilingarian A., Daryan A., Arakelyan K. et al. Ground-based observations of thunderstorm-correlated fluxes of high-energy electrons, gamma-rays, and neutrons // Phys. Rev. D. 2010. Vol. 82. P. 043009.
- 32. Chilingarian A., Bostanjyan N., Vanyan L. Neutron bursts associated with thunderstorms // Ibid. 2012. Vol. 85. 085017 [DOI:10.1103/PhysRevD.85.085017].
- 33. Chilingarian A., Bostanjyan N., Karapetyan T., Vanyan L. Remarks on recent results on neutron production during thunderstorms // Ibid. 2012. Vol. 86. P. 093017.
- 34. Chilingarian A., Hovsepyan G., Kozliner L. Thunderstorm ground enhancements: gamma-ray differential energy spectra // Ibid. 2013. Vol. 88. P. 073001.
- 35. Chilingarian A., Hovsepyan G., Mantasakanyan E. Mount Aragats as a stable electron accelerator for atmospheric high-energy physics research // Ibid. 2016. Vol. 93. P. 052006.
- 36. Torii T., Sugita T., Tanabe S. et al. Gradual increase of energetic radiation associated with thunderstorm activity at the top of Mt. Fuji // Geophys. Res. Lett. 2009. Vol. 36, P. L13804 [DOI:10.1029/2008GL037105].
- 37. Tavani M., Marisaldi M., Labanti C. et al. Terrestrial gamma-ray flashes as powerful particle accelerators // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106. 018501 [DOI:10.1103/PhysRevLett.106.018501].
- 38. Gurevich A. V., Antonova V. P., Chubenko A. P. et al. Strong flux of low-energy neutrons produced by thunderstorms // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. P. 125001.
- 39. Gurevich A. V., Antonova V. P., Chubenko A. P. et al. The time structure of neutron emission during atmospheric discharge // Atmos. Res. 2015. Vol. 164–165. P. 339.
- 40. Gurevich A. V., Almenova A. M., Antonova V. P. et al. Observations of high-energy radiation during thunderstorms at Tien-Shan // Phys. Rev. D. 2016. Vol. 94. P. 023003.

- 41. Tran M. D., Rakov V. A., Mallick S. et al. A terrestrial gamma-ray flash recorded at the Lightning Observatory in Gainesville, Florida // J. Atmos. Sol. Terr. Phys. 2015. Vol. 136. P. 86–93.
- 42. Kelley N. A., Smith D. M., Dwyer J. R. et al. Relativistic electron avalanches as a thunderstorm discharge competing with lightning // Nature Commun. 2015. Vol. 6:7845. P. 1–7.
- 43. Kuroda Y., Oguri S., Kato Y. et al. Observation of gamma-ray bursts at ground level under the thunderclouds // Phys. Lett. B. 2016. Vol. 758. P. 286–291.
- 44. Enoto T., Wada Y., Furuta Y. et al. Photonuclear reactions in lightning discovered from detection of positrons and neutrons // Nature. 2017. Vol. 551. P. 481.
- 45. Stanley M. A., Shao X.-M., Smith D. M. et al. A link between terrestrial gamma-ray flashes and intracloud lightning discharges // Geophys. Res. Lett. 2006. Vol. 33. P. L06803.
- 46. Shao X.-M., Hamlin T., Smith D. M. A closer examination of terrestrial gamma-ray flash-related lightning processes // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A00E30.
- 47. McCarthy M., Parks G. K. On the modulation of X-ray fluxes in thunderstorms // Ibid. 1992. Vol. 97. P. 5857–5864.
- 48. Gurevich A. V., Milikh G. M., Roussel-Dupré R. A Runaway electron mechanism of air breakdown and preconditioning during a thunderstorm // Phys. Lett. A. 1992. Vol. 165. P. 463.
- 49. Dwyer J. A fundamental limit on electric fields in air // Geophys. Res. Lett. 2003. Vol. 30. P. 2055.
- 50. Babich L. P., Donskoy E. N., Kutsyk I. M., Roussel-Dupré R. A. The feedback mechanism of runaway air breakdown // Ibid. 2005. Vol. 32. P. 1-5.
- 51. Meek J. M., Craggs J. D. Electrical breakdown of gases. Oxford, U.K.: Clarendon Press, 1953.
- 52. Райзер Ю. П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1992.
- 53. Babich L. P. Highenergy phenomena in electric discharges in dense gases: theory experiment and natural phenomena. Arlington, Virginia, USA: Futurepast Inc, 2003.
- 54. Chadwick J. // Nature. 1932. Vol. 129. P. 312 [DOI: 101038/129312a0].
- 55. Libby L. M., Lukens H. R. Production of radiocarbon in tree rings by lightning bolts // J. Geophys. Res. 1973. Vol. 78. P. 5902.
- 56. Fleisher R. L., Palmer J. L., Crouch K. Are neutrons generated by lightning // Ibid. 1974. Vol. 79. P. 5013.
- 57. Fleisher R. L. Search for neutron generation by lightning // Ibid. 1975. Vol. 80. P. 5005–5009.
- 58. Shah G. N., Razdan H., Bhat C. L., Ali Q. M. Neutrons generation in lightning bolts // Lett. to Nature. 1985. Vol. 313. P. 773–775.
- 59. Shyam A., Kaushik T. C. Observation of neutron bursts associated with atmospheric lightning discharge // J. Geophys. Res. 1999. Vol. 104. P. 6867–6869.
- 60. Бабич Л. П. Генерация нейтронов в гигантских восходящих атмосферных разрядах // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 84. С. 345–348.
- 61. Bratolyubova-Tsulukidze L. S., Grachev E. A., Grigoryan O. R. Thunderstorms as the probable reason of high background neutron fluxes at L < 1.2 // Adv. in Space Res. 2004. Vol. 34. P. 1815.

- 62. Кужевский Б. М. Генерация нейтронов в молниях // Вестник московского университета. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2004. Т. 5. С. 14-16.
- 63. Martin I. M., Alves M. A. Observation of a possible neutron burst associated with a lightning discharge // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. A00E11 [DOI: 10.1029/2009JA014498].
- 64. Стародубцев С. А., Козлов В. И., Торопов А. А. и др. Первые экспериментальные наблюдения всплесков нейтронов под грозовыми облаками вблизи уровня моря // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96. С. 201–204.
- 65. Козлов В. И., Муллаяров В. А., Торопов А. А. Всплески нейтронов во время молниевых разрядов облако—земля // Изв. РАН. Сер. физическая. 2013. Т. 77. С. 652—654.
- 66. Kozlov V. I., Mullayarov V. A., Starodubtsev S. A., Toropov A. A. Neutron bursts associated with lightning cloud-to-ground discharges // J. of Physics: Conf. Series. Vol. 409. P. 012210.
- 67. Ishtiaq P. M., Mufti S., Darzi M. A. et al. Observation of 2.45 MeV neutrons correlated with natural atmospheric lightning discharges by lead-free gulmarg neutron monitor // J. of Geophys. Res. Atmos. 2016. Vol. 121. P. 692–703.
- 68. Carlson B. E., Lehtinen N. G., Inan U. S. Neutron production in terrestrial gamma-ray flashes // Ibid. 2010. Vol. 115. P. A00E19 [DOI:10.1029/2009JA014696].
- 69. Carlson B. E., Lehtinen N. G., Inan U. S. Constraints on terrestrial gamma-ray flash production from satellite observation // Geophys. Res. Lett. 2007. Vol. 34. P. L08809.
- 70. Dwyer J. R., Smith D. M. A comparison between Monte Carlo simulations of runaway breakdown and terrestrial gamma-ray flash observations // Ibid. 2005. Vol. 32. P. L22804.
- 71. Clem J. M., Dorman L. I. // Space Sci. Rev. 2000. Vol. 93. P. 335–359.
- 72. Shibata S., Munakata Y., Tatsuoka R. et al. // Nucl. Instrum. Meth. 2001. Vol. 326. P. A463.
- 73. Бабич Л. П., Донской Е. Н., Куцык И. М., Рюссель-Дюпре Р. А. Тормозное излучение лавины релятивистских убегающих электронов в атмосфере // Геомагнетизм и аэрономия. 2004. Т. 44, № 5. С. 697–703.
- 74. Lehtinen N. G., Walt M., Inan U. S. et al. Gamma-ray emission produced by a relativistic beam of runaway electrons accelerated by quasi-electrostatic thundercloud fields // Geophys. Res. Lett. 1996. Vol. 23(19). P. 2645–2648.
- 75. Babich L. P., Bochkov E. I., Kutsyk I. M., Roussel-Dupré R. A. Localization of the source of terrestrial neutron bursts detected in thunderstorm atmosphere // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A00E28.
- 76. Babich L. P., Bochkov E. I., Donskoy E. N., Kutsyk I. M. Source of prolonged bursts of high-energy gamma-rays detected in thunderstorm atmosphere in Japan at the coastal area of the Sea of Japan and on high mountain top // Ibid. 2010. Vol. 115. P. A09317.
- 77. Babich L. P., Bochkov E. I., Kutsyk I. M., Rassoul H. K. Analysis of fundamental interactions capable of producing neutrons in thunderstorm atmosphere // Phys. Rev. D. 2014. Vol. 89. P. 093010.
- 78. Бабич Л. П., Бочков Е. И., Залялов А. Н., Куцык И. М. Об усилении потока нейтронов в грозовой атмосфере и возможности их регистрации // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. С. 333.

- 79. Babich L. P., Bochkov E. I., Dwyer J. R., Kutsyk I. M., Zalyalov A. N. Numerical analysis of 2010 high-mountain (Tien-Shan) experiment on observations of thunderstorm-related low-energy neutron emissions // J. of Geophys. Res. 2013. Vol. 118.
- 80. Babich L. P. Fundamental processes capable of accounting for the neutron flux enhancements in thunderstorm atmosphere // JETP. 2014. Vol. 118. P. 375–383.
- 81. Tsuchiya H. Surrounding material effect on measurement of thunderstorm-related neutrons // Astropart. Phys. 2014. Vol. 33. P. 57.
- 82. Бабич Л. П., Донской Е. Н., Илькаев Р. И. и др. Фундаментальные характеристики лавины релятивистских убегающих электронов в воздухе // Физика плазмы. 2004. Т. 30. Р. 666–674.
- 83. Dwyer J. R., Babich L. P. Low-energy electron production by relativistic runaway electron avalanches in air // J. of Geophys. Res. 2011. Vol. 116. P. A0931.
- 84. Srivastava Y. N., Widom A., Larsen L. A primer for electro-weak induced low energy nuclear reactions // Pramana J. of Phys. 2010. Vol. 75. P. 617.
- 85. Бабич Л. П. Механизм генерации нейтронов, коррелированных с разрядами молнии. // Геомагнетизм и аэрономия. 2007. Т. 47. С. 702–708.
- 86. Babich L. P., Roussel-Dupré R. A. The origin of neutron flux increases observed in correlation with lightning // J. of Geophys. Res. 2007. Vol. 112. P. D13303.
- 87. Babich L. P., Kudryavtsev A. Yu., Kudryavtseva M. L., Kutsyk I. M. Terrestrial gamma-ray flashes and neutron pulses from direct simulations of gigantic upward atmospheric discharge // JETP Lett. 2007. Vol. 85. P. 483–487.
- 88. Babich L. P., Kudryavtsev A. Yu., Kudryavtseva M. L., Kutsyk I. M. Atmospheric gamma-ray and neutron flashes // ZhÉTF. 2008. Vol. 133. P. 80–94.
- 89. Grigoriev A. V., Grigoryan O. R., Drozdov A. Y. et al. Thunderstorm neutrons in near space: Analyses and numerical simulation // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A00E52.
- 90. Fülöp T., Landreman M. Ion runaway in lightning discharges // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 111. P. 015006.
- 91. Paiva G. S., Taft C. A., Carvalho M. C., Furtado N. C. Gamma-rays in association with the rocket-triggered lightning caused by neutron bursts // Atmos. and Climate Sci. 2013. Vol. 3. P. 459.
- 92. Бабич Л. П., Лойко Т. В., Цукерман В. А. Высоковольтный наносекундный разряд в плотных газах при больших перенапряжениях, развивающийся в режиме убегания электронов // УФН. 1990. Т. 160. С. 49–82.
- 93. Тарасенко В. Ф., Яковленко С. И. Механизм убегания электронов в плотных газах и формирование мощных субнаносекундных электронных пучков // Там же. 2004. Т. 174. С. 953-971.
- 94. Бабич Л. П. Анализ нового механизма убегания электронов и рекордных токов убегающих электронов, достигнутых в новых экспериментах с разрядами в плотных газах // Там же. 2005. Т. 175. С. 1069–1091.
- 95. Agafonov A. V., Bagulya A. V., Dalkarov O. D. et al. Observation of neutron bursts produced by laboratory high-voltage atmospheric discharge // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 111. P. 115003.

- 96. Agafonov A. V., Bogachenkov V. A., Chubenko A. P. et al. Observation of hard radiations in a laboratory atmospheric high-voltage discharge [Electronic resource]. https://arXiv:1604.07784v1 [physics.plasm-ph]. 26 April 2016.
- 97. Babich L. P. Analysis of laboratory experiment on neutron generation by discharges in the open atmosphere [Electronic resource]. http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevC.00.004600.
- 98. Symlalisty E. M. D., Roussel-Dupré R. A., Babich L. P. et al. Re-evaluation of electron avalanche rates for runaway and upper atmospheric discharge phenomena // Eos Trans. American Geophysical Union. 1997. Vol. 78. P. 4760.
- 99. Babich L. P., Kutsyk I. M., Kudryavtsev A. Yu., Donskoy E. N. New data on space and time scales of relativistic runaway electron avalanche for thunderstorm environment: Monte Carlo calculations // Phys. Lett. A. 1998. Vol. 245. P. 460–470.
- 100. Lehtinen N. G., Bell T. F., Inan U. S. Monte Carlo simulation of runaway MeV electron breakdown with application to red sprites and terrestrial gamma ray flashes // J. of Geophys. Res. 1999. Vol. 104. P. 24699–24712.
- 101. Babich L. P., Donskoy E. N., Kutsyk I. M. et al. Comparison of relativistic runaway electron avalanche rates obtained from monte carlo simulations and from kinetic equation solution // IEEE Trans. on Plasma Sci. 2001. Vol. 29. P. 430–438.
- 102. Бабич Л. П., Донской Е. Н., Илькаев Р. И. И др. Скорость развития лавины релятивистских убегающих электронов для нормальных условий // Докл. АН. 2001. Т. 379. С. 606–608.
- 103. Бабич Л. П., Донской Е. Н., Куцык И. М. Анализ атмосферных вспышек гамма-излучения, зарегистрированных в ближнем космосе, с учетом транспорта фотонов в атмосфере // ЖЭТФ. 2008. Р. 65-79.
- 104. Гуревич А. В., Зыбин К. П. Пробой на убегающих электронах и электрические разряды во время грозы // УФН. 2001. Т. 171. С. 1177.
- 105. Gurevich A. V., Carlson H. C., Medvedev Yu. V., Zybin K. P. Generation of electron-positron pairs in runaway breakdown // Phys. Lett. A. 2000. Vol. 275. P. 101–108.
- 106. Hazelton B. J., Grefenstette B. W., Smith D. M. et al. Spectral dependence of terrestrial gamma-ray flashes on source distanc // Geophys. Res. Lett. 2009. Vol. 36. P. L01108.
- 107. Cohen M. B., Said R. K., Inan U. S. et al. A lightning discharge producing a beam of relativistic electrons into space // Ibid. 2010. Vol. 37. P. L18806.
- 108, Babich L. P. Thunderous nuclear reactions // Nature, 2017, Vol. 551, P. 443-444.
- 109. Babich L. P. Radiocarbon production by thunderstorms // Geophys. Res. Lett. 2017. Vol. 44.
- 110. Dwyer J. R. Relativistic breakdown in planetary atmospheres // Phys. Plasmas. 2007. Vol. 14(4). P. 042901.
- 111. Dwyer J. R., Rassoul H., Al-Dayeh M. et al. X-ray bursts associated with leader steps in cloud-to-ground lightning // Geophys. Res. Lett. 2005. Vol. 32. P. L01803.
- 112. Babich L. P., Donskoy E. N., Dwyer J. R., Kutsyk I. M. Analysis of the experiment on the registration of X-rays of the stepped leader of the lightning discharge to the ground // J. of Geophys. Res. 2013. Vol. 118. P. 2573–2582.

113. Бабич Л. П., Лойко Т. В. Убегающие электроны при высоковольтных наносекундных разрядах в гексафториде серы атмосферной плотности // ЖТФ. 1991. Т. 61. С. 153–155.

114. Бабич Л. П., Лойко Т. В. Generalized Paschen's law for overvoltage conditions // IEEE Trans. on Plasma Sci. 2016. Vol. 44. P. 3243–3248.

### **Thunderous Neutrons**

#### L. P. Babich

Current status of the research of thunderous nuclear reactions is reviewed. Results of observations are described of neutron flux amplifications occurred in thunderclouds and in thunderstorm times. The amplifications are connected with photonuclear reactions on account of bremstrahlung of avalanches of high-energy runaway electron developing in thunderous electric fields. A difficulty is noted of a selection of thunderous neutrons connected with that detectors are immersed in a mixed field of different penetrating emissions, including along with neutrons primary high-energy electrons and their bremsstrahlung. A special attention is given to a discovery of electron-positron annihilation line with photon energy 0.511 MeV in thunderous atmosphere providing trustworthy evidence of the neutron production and their photonuclear origin. Consequences of this discovery are discussed.

УДК 539.9: 551.594

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 274 289

# Наработка радиоуглерода грозами

Л. П. Бабич

В связи с усилением потока нейтронов во времена гроз выполнен анализ вклада грозовых нейтронов в наработку атмосферного радиоуглерода. Оценки флюенса грозовых нейтронов на один электромагнитный импульс молнии в областях с сильной грозовой активностью, обеспечивающего локальную скорость наработки радиоуглерода, сопоставимую с наблюдательными данными, согласуются с измеренными значениями флюенса грозовых нейтронов. Доступные наблюдательные данные об атмосферных нейтронах и вспышках первичного у-излучения, коррелированных с грозами, не позволяют сделать окончательный вывод о вкладе гроз в наработку радиоуглерода. Требуются многочисленные исследования высокоэнергетических явлений в грозах, прежде всего в тропическом поясе, где грозовая активность особенно интенсивна и наработка радиоуглерода галактическими космическими лучами почти не зависит от активности Солнца, возмущающей геомагнитное поле, экранирующее Землю от космического излучения.

### Введение

Нейтроны естественных источников имеют неоценимое значение, так как «поставляют количественную информацию о процессах, их создающих, и потому что вызванные ими трансмутации могут являться инструментами для понимания других физических, химических или хронологических процессов. Поскольку грозовые нейтроны поступают непосредственно в тропосферу, их значение увеличивалось бы на малых географических масштабах при условии, что они составляют заметную долю атмосферных нейтронов» [1].

На точность датировки по радиоуглероду (изотоп  $^{14}_{6}$ C) влияют изменения концентрации атмосферного  $^{14}_{6}$ C [2, 3], которые связаны с вариациями потока галактических космических лучей, производящих радиоуглерод, и геомагнитного поля, экранирующего Землю от космических лучей. В масштабах датировки по радиоуглероду поток космических лучей довольно постоянен, но на экранирующую способность геомагнитного поля влияет солнечная активность; следовательно, вариации последней приводят к вариациям в темпе производства радиоуглерода (ТПР) [3–8]. С другой стороны, авторы работы [9] связывают импульсное увеличение концентрации космогенного радиоуглерода в древесных кольцах (12 %) в 750 г. н. э. с сильной вспышкой галактических у-лучей. Флуктуации любого происхождения ограничивают «точность радиоуглеродной калибровки единичных образцов в лучшем случае столетием... или, во многих случаях, намного хуже, совершенно независимо от точности измерений» [3]. Грозовые нейтроны могут иметь важные следствия для радиоуглеродной датировки; в частности, могут увеличить упомянутую неопределенность. В данной статье анализируется возможный вклад грозовых нейтронов в производство  $^{14}_{6}$ C.

<sup>©</sup> Geophysical Research Letters. 2017. Vol. 44 [DOI.org/10.1002/2017GL075131].

### История проблемы

Широко известна гипотеза Чарльза Вильсона (Charles Wilson), опубликованная в 1924 г. [10], об ускорении («убегании» [11]) электронов в электрических полях грозовых облаков. Менее известна гипотеза Вильсона о возможности ядерных реакций в грозах. Однако состояние ядерной физики в 1920-е гг. позволило только упомянуть распад или синтез ядер. В настоящее время известно, что нейтроны оказываются среди возможных дочерних продуктов ядерных реакций, но в 1924 г. нейтрон не был даже открыт. Полстолетия спустя Либби (Libby) и Лукенс (Lukens) [12] реанимировали гипотезу Вильсона. Их интерес к способности грозовой активности производить нейтроны был мотивирован попыткой объяснить кратковременные вариации концентрации  $^{14}_{6}$ С в древесных кольцах. Суисс (Suess) [13] обнаружил, что вариации  $^{14}_{6}$ С в древесных кольцах коррелированы с числом пятен на Солнце, поэтому он связал вековые вариации с флуктуациями интенсивности солнечных космических лучей. Последние слишком малы, чтобы влиять непосредственно на ТПР, однако активность Солнца влияет на электрическую активность атмосферы, а от нее зависит частота гроз. Либби и Лукенс полагали, что вероятная модуляция производства  $^{14}_{6}$ С разрядами молнии и накопление этого изотопа в биомассе объясняет корреляцию, отмеченную Суиссом.

За первой (с нулевым результатом) попыткой [14] обнаружить грозовые нейтроны последовали сообщения, в которых объявлялось о наблюдении усиления потока нейтронов в грозах [15-31]. Возможно, следуя Либби и Лукенсу, генерацию нейтронов грозами связывали с реакциями синтеза  $d(d,n)^3_2$ Не в разрядах молнии [14–17]. Однако энергия дейтронов в каналах молнии слишком мала для протекания этих реакций [32-36]. Поскольку интенсивные земные вспышки у-излучения (TGFs – Terrestrial Gamma-ray Flashes) с продолжительностью  $\Delta t_{\gamma}$  порядка 1 мс, обнаруженные в ближнем космосе [37-43], на борту самолета [44] и на поверхности Земли [31, 45, 46], и продолжительные  $\gamma$ -вспышки ( $\Delta t_{\gamma}$  до десятков минут), обнаруженные на поверхности Земли [20–24, 26, 31, 47-51], коррелированы с грозами и их спектры простираются до энергии 100 МэВ [43], т. е. выше порогов  $\varepsilon_{\text{th,N}} = 10,55 \text{ МэВ и } \varepsilon_{\text{th,O}} = 15,7 \text{ МэВ фотоядерных реакций } ^{14}_{7}\text{N} + \gamma \rightarrow ^{13}_{7}\text{N} + \text{n},$ и реакций электродезинтеграции  ${}^{14}_{7}N + e^{-} + \epsilon_{e} \rightarrow {}^{13}_{7}N + n + e^{-},$  ${}^{16}_{8}O + \gamma \rightarrow {}^{15}_{8}O + n$  $^{16}_{8}{
m O} + {
m e}^{-} + \epsilon_{
m e} 
ightarrow ^{15}_{8}{
m O} + {
m n} + {
m e}^{-}$ , эти реакции – самые очевидные процессы, отвечающие за грозовые нейтроны [20, 21, 32–36, 52]. Поскольку грозовые  $\gamma$ -лучи являются тормозным излучением лавин релятивистских убегающих электронов, способных развиваться в электрических полях грозовых облаков [53], замечательно то, что средняя энергия электронов в лавинах 6-7 МэВ [54-57] в электрических полях с напряженностью ниже порога самостоятельного пробоя в атмосфере не намного ниже порога  $\varepsilon_{th N}$ .

В связи с первыми наблюдениями [15–17] усиления потока нейтронов в корреляции с электромагнитными импульсами (ЭМИ) молнии Бабич и Руссель-Дюпре (Roussel-Dupré) [34] выполнили анализ производства  $^{14}_{\ 6}$ С грозами. Учитывая только одну конкурирующую реакцию  $^{14}_{\ 7}$ N(n, $\gamma$ ) $^{15}_{\ 7}$ N, они оценили объемный (м $^{-3}\cdot c^{-1}$ ) ТПР тепловыми нейтронами:

$$\dot{N}_{\text{thund,vol}} \begin{pmatrix} 14 \\ 6 \end{pmatrix} = N_{\text{n1}} \cdot R_{\text{flash,glob}} \cdot \delta / V_{\text{trop}},$$
 (1)

где число  $N_{\rm n1}$  — число нейтронов на удар молнии;  $R_{\rm flash,glob}$  — глобальная частота вспышек молнии;  $\delta$  — доля ЭМИ молнии, коррелированных с производством нейтронов;  $V_{\rm trop} \approx 4\pi \left(R_{\rm Earth}\right)^2 \cdot l_{\rm trop}$  — объем тропосферы,  $R_{\rm Earth} \approx 6370$  км — радиус Земли,  $l_{\rm trop}$  — высота тропосферы. Значения всех величин в (1), особенно  $\delta$  и  $N_{\rm n1}$ , сильно зависят от измерений и вычислений. Используя  $R_{\rm flash,glob} \approx 100$ /с,  $l_{\rm trop} \approx 10$  км,  $\delta = 0.01$  (согласно [15]) и число грозовых нейтронов  $N_{\rm n1} = 10^{15}$  на вспышку, предсказанное самими авторами, они получили  $\dot{N}_{\rm thund,vol} \left(\frac{14}{6}{\rm C}\right) \approx 2 \cdot 10^{-4} \; {\rm m}^{-3} \cdot {\rm c}^{-1}$ , что на два порядка ниже значения  $1.85 \cdot 10^{-2} \; {\rm m}^{-3} \cdot {\rm c}^{-1}$  вследствие космического облучения атмосферы, которое авторы оценили, используя период полураспада  $^{14}_{6}{\rm C}$  и довольно неопределенное значение концентрации  $^{14}_{6}{\rm C}$  в атмосфере согласно [58]. Кроме того, фотоядерные нейтроны, первоначально распределенные в мегаэлектронвольтной области [59], во время замедления испытывают множественные взаимодействия с ядрами воздуха. Бабич и Руссель-Дюпре заключают, что в настоящее время вклад грозовых нейтронов в концентрацию  $^{14}_{6}{\rm C}$  в среднем по земному шару мал, но локально, особенно в тропиках, производство  $^{14}_{6}{\rm C}$  грозами, возможно, конкурирует с производством космическим облучением.

Ввиду недостатков работы [34] и учитывая новые экспериментальные [19–31, 38–51, 60–62], аналитические и вычислительные [26, 35, 36, 52, 54, 55, 59, 62–70] данные по грозовым  $\gamma$ -лучам и нейтронам, целесообразен новый анализ возможности производства  $^{14}_{\ 6}$ С грозами, который базировался бы не на ограниченном числе наблюдений грозовых нейтронов, как в работе [34], но на данных обширного числа новых наблюдений усиления потока высокоэнергетических электронов, жесткого  $\gamma$ -излучения и нейтронов на поверхности Земли по всему миру: Армения (Арагац, 3250 м над уровнем моря) [20–23], Япония (уровень моря и 2770 м над уровнем моря) [49–51], Китай (Тибет, 4300 м над уровнем моря) [26], Индия (Гималаи, 2743 м над уровнем моря) [15, 30], Казахстан (Тянь-Шань, 3340 м над уровнем моря) [27–29].

Уместно отметить, что, поскольку пробеги фотонов с энергиями  $\varepsilon_{\gamma} \ge \varepsilon_{\text{th},N}$  намного превышают поперечные размеры каналов молнии, производящие нейтроны реакции протекают вне каналов [35, 36, 67, 68]. Импульсы нейтронов могут лишь коррелировать с ЭМИ молнии; довольно часто они наблюдаются до ЭМИ и даже не коррелируют с ЭМИ. Так, продолжительные  $\gamma$ -вспышки (до 1 мин), первичные для нейтронов, наблюдались до ЭМИ [49–51] и, следовательно, не генерировались разрядами молнии. Даже TGFs, продолжительность которых обычно короче 1 мс, наблюдаются в пределах -3/+1 мс относительно ЭМИ [60, 61]. Поэтому ниже формулировку «корреляция с ЭМИ молнии» следует понимать как корреляцию с грозами или даже с формированиями грозовых облаков, поскольку нет иного способа измерить глобальную частоту гроз, нежели посредством регистрации ЭМИ разрядов молнии.

# Число грозовых нейтронов, необходимое для сопоставления производства радиоуглерода грозами с наблюдаемым производством

Число нейтронов  $N_{\rm n1}$ , произведенное в корреляции с одним ЭМИ молнии, можно вычислить с помощью элементарного уравнения баланса:

$$\frac{dN_{\text{n1}}}{dt} = I - \frac{N_{\text{n1}}}{\tau_{\text{abs}}}, \quad I = \begin{cases} S_{\text{source}}, & 0 \le t \le \Delta t; \\ 0, & t > \Delta t. \end{cases}$$
 (2)

Здесь  $S_{\rm source}$  — источник нейтронов с продолжительностью, равной продолжительности первичного  $\gamma$ -импульса;  $\Delta t \approx \Delta t_{\gamma}$ ;  $\tau_{\rm abs} = 1/2 N_{\rm air} \upsilon_{\rm n} \sigma_{\rm abs}$ ,  $N_{\rm air}$  — концентрация молекул воздуха,  $\upsilon_{\rm n}$  — скорость нейтронов,  $\sigma_{\rm abs} = \sum_i \sigma_i$  — сечение поглощения нейтронов,  $\sigma_i$  — сечение взаимодействия нейтронов i-типа с ядрами воздуха. Решение этого уравнения с начальным условием  $N_{\rm n1}(0)$ :

$$N_{\rm n1}(t) = S_{\rm source} \tau_{\rm abs} \begin{cases} 1 + \left(\frac{N_{\rm n1}(0)}{S_{\rm source} \tau_{\rm abs}} - 1\right) \exp\left(-t/\tau_{\rm abs}\right), & 0 \le t \le \Delta t; \\ \left(1 + \left(\frac{N_{\rm n1}(0)}{S_{\rm source} \tau_{\rm abs}} - 1\right) \exp\left(-t/\tau_{\rm abs}\right)\right) \exp\left(\frac{\Delta t - t}{\tau_{\rm abs}}\right), & t > \Delta t. \end{cases}$$
(3)

Производство  ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$  на один удар (stroke) молнии можно оценить, используя уравнение баланса:

$$\frac{dN_{\rm str} \left( {}^{14}_{6} \mathrm{C} \right)}{dt} = \frac{N_{\rm nl}}{\tau_{14}},\tag{4}$$

где  $\tau_{14} = 1/2 N_{air} \upsilon_n \sigma_{14}$ ,  $\sigma_{14}$  – сечение реакции  $^{14}_{7} N(n,p)^{14}_{6} C$ . Распадом ядер  $^{14}_{6} C$  пренебрегается вследствие слишком большого периода полураспада (5730 лет) по сравнению с  $\tau_{14}$ .

Интегрирование уравнения (4) совместно с соотношением (3) в диапазоне от t=0 до  $\infty$  (фактически до  $\Delta t + (2-3)\tau_{\rm abs}$ ) с очевидными условиями  $N_{\rm n1}(0) = 0$  и  $N_{\rm str}\left({}^{14}_{6}{\rm C}\right) = 0$  при t=0 дает

$$N_{\rm str} {14 \choose 6} = S_{\rm source} \Delta t \frac{\tau_{\rm abs}}{\tau_{14}} = N_{\rm n1} \frac{\sigma_{14}}{\sigma_{\rm abs}}.$$
 (5)

Эта формула может быть получена просто комбинацией уравнений (2) и (4) и интегрированием результата в том же диапазоне и с теми же условиями.

Глобальный ТПР оценивается следующим образом:

$$\dot{N}_{\text{thund}} \begin{pmatrix} 1^{4} \text{C} \end{pmatrix} = N_{\text{str}} \begin{pmatrix} 1^{4} \text{C} \end{pmatrix} R_{\text{flash}} n_{\text{str}} \delta,$$
 (6)

где  $R_{\rm flash}$  — глобальная частота вспышек молнии на единицу площади поверхности Земли (м $^{-2} \cdot {\rm c}^{-1}$ ),  $n_{\rm str}$  — число ударов, составляющих одну вспышку.

В работе [34] ТПР оценивается по предсказанному авторами числу нейтронов  $N_{\rm n1}=10^{15}$ . Но доступно только незначительное число измерений числа грозовых нейтронов, так что значение  $N_{\rm n1}$  крайне неопределенное; поэтому разумно вычислить  $N_{\rm n1}$ , требуемое для согласия с глобальным ТПР (м $^{-2}\cdot {\rm c}^{-1}$ ), который должен включать ТПР вследствие космического облучения атмосферы  $\dot{N}_{\rm cosm}\left(^{14}_{6}{\rm C}\right)$  и грозовой  $\dot{N}_{\rm thund}\left(^{14}_{6}{\rm C}\right)$ . Тогда число грозовых нейтронов  $N_{\rm n1}$ , необходимое, чтобы ТПР  $\dot{N}_{\rm thund}\left(^{14}_{6}{\rm C}\right)$  составлял часть k от  $\dot{N}_{\rm cosm}\left(^{14}_{6}{\rm C}\right)$ , получается объединением (5) и (6):

$$N_{\rm n1} = \frac{\sigma_{\rm abs}}{\sigma_{\rm 14}} \cdot \frac{k \dot{N}_{\rm cosm} \binom{14}{6} C}{n_{\rm str} R_{\rm flosh} \delta}.$$
 (7)

Это соотношение включает ТПР на единицу площади  $\dot{N}_{\rm cosm} \left( {}^{14}_{6} C \right)$ , которая прямо соответствует размерности (м $^{-2} \cdot {\rm c}^{-1}$ ) измеренных и вычисленных значений ТПР, тогда как использование глобальной частоты вспышек  $R_{\rm flash,glob}({\rm c}^{-1})$  в соотношении (1) вынудило авторов [34] включить деление на  $V_{\rm trop} = 4 \left( R_{\rm Earth} \right)^2 l_{\rm trop}$  с произвольно принятым значением высоты тропосферы  $l_{\rm trop} = 10$  км, чтобы сравнить результат с довольно неопределенным значением объемного ТПР, который они сами оценили довольно грубо.

Для дальнейших оценок требуются численные значения величин в соотношении (7). Весьма удачно, что  $N_{\rm n1}$  не зависит от продолжительности  $\Delta t_{\gamma}$  и высоты вспышек первичных грозовых  $\gamma$ -лучей, поскольку  $\Delta t_{\gamma}$  меняется в диапазоне от сотен миллисекунд до десятков минут (см., например, [20, 21, 26, 55] и цитируемую литературу). Кроме того, поскольку пробеги  $\gamma$ -фотонов с энергиями выше фотоядерного порога  $\varepsilon_{\rm th,N}$  очень велики, нейтроны производятся на разных высотах и, следовательно, при разной плотности воздуха.

В зависимости от долготы, широты и времени года частота вспышек молнии  $R_{\rm flash}$  (фактически — частота регистрируемых ЭМИ) меняется в очень широком диапазоне. В областях с высокой грозовой активностью (максимальная находится на суше тропического пояса [71])  $R_{\rm flash}$  меняется от 1 до 80 на квадратный километр за год [38], т. е. от  $3,3\cdot10^{-14}$  до  $2,7\cdot10^{-12}$  м $^{-2}\cdot c^{-1}$ . Измеренная глобальная частота разрядов молнии равна 45 с $^{-1}$  [72–75]). Деление этого значения на площадь поверхности Земли  $S_{\rm Earth} \approx 4\cdot10^{14}$  м $^2$  дает значение глобальной частоты вспышек  $10^{-13}$  м $^{-2}\cdot c^{-1}$ , что находится в пределах приведенного выше диапазона  $R_{\rm flash}$ . Типичное число ударов во вспышке  $n_{\rm str}=3$  [76]. Для продолжительных событий [23, 24, 26, 31, 47, 49–51] с  $\gamma$ -вспышками, предшествующими ЭМИ молнии, очевидно, следует полагать  $n_{\rm str}=1$ .

Вычисленные значения космогенного ТПР  $\dot{N}_{\rm cosm} {14 \choose 6} {\rm C}$  меняются от  $1,6\cdot 10^4$  до  $(2,5\pm 0,5)\cdot 10^4~{\rm M}^{-2}\cdot {\rm C}^{-1}$  в зависимости от долготы, широты и высоты над уровнем моря [3, 4, 13, 77–81]. Автор работы [3] отмечает, что «попытки непосредственно измерить темп производства на уровне земли [82] и на высоте [80] недостаточно хорошо согласуются с этими оценками». С другой стороны, значение  $\dot{N}_{\rm cosm} {14 \choose 6} {\rm C} \approx 1,96\cdot 10^4~{\rm M}^{-2}\cdot {\rm C}^{-1}$ , вычисленное Полуяновым и др. [81],

согласуется со значением  $(1,83\pm0,05)\cdot10^4 \text{ м}^{-2}\cdot\text{c}^{-1}$ , измеренным Кану (Kanu) и др. в стратосфере [83]. Таким образом, для дальнейших оценок разумно принять  $\dot{N}_{\text{cosm}} \binom{14}{6} \text{C} = 2\cdot10^4 \text{ м}^{-2}\cdot\text{c}^{-1}$ .

Первоначально фотоядерные нейтроны, произведенные  $\gamma$ -лучами со спектром тормозного излучения лавины релятивистских убегающих электронов [84], распределены в диапазоне энергий от 10 до 16 МэВ с максимумом при  $\approx$ 3 МэВ [59] или ниже 10 МэВ с максимумом при  $\approx$ 2 МэВ [52]. Эти нейтроны взаимодействуют с ядрами основных элементов атмосферы (азот и кислород) и протонами водорода молекул воды в грозовых облаках. Соответствующие сечения, доступные, например, в базе данных [85], должны быть взвешены по содержанию компонентов атмосферы; однако для оценки отношения  $\sigma_{abs}/\sigma_{14}$  в пределах точности данного анализа достаточно учесть реакции с азотом:

$${}^{14}_{7}N(n,\alpha){}^{11}_{5}B, {}^{14}_{7}N(n,t){}^{12}_{6}C, {}^{14}_{7}N(n,d){}^{13}_{6}C, {}^{14}_{7}N(n,\gamma){}^{15}_{7}N, {}^{14}_{7}N(n,p){}^{14}_{6}C.$$
(8)

Во-первых, рассмотрим захват нейтронов протонами  ${}^1_1\mathrm{H}(\mathsf{n},\gamma){}^2_1\mathrm{H}$ . На высотах h=1-2,5 км внутри кучевого облака измерена плотность воды  $\rho_{\mathrm{water}} \approx \left(0,33-1,7\right)\,\mathrm{r}\cdot\mathrm{m}^{-3}\,$  [86]. В модели «газа» капелек с радиусом  $r_{\mathrm{dr}}=1$  мкм с концентрацией  $n_{\mathrm{dr}}=10^9~\mathrm{m}^{-3}\,$  [87] плотность воды несколько выше:  $\rho_{\mathrm{water}} \approx 4~\mathrm{r}\cdot\mathrm{m}^{-3}$ . Оба значения  $\rho_{\mathrm{water}}$  на порядки величины меньше плотности сухого воздуха  $\approx 1,29~\mathrm{kr}\cdot\mathrm{m}^{-3}\cdot\mathrm{exp}\left(-h(\mathrm{km})/7,1\right)$  на представляющих интерес высотах h (тропосфера и нижняя стратосфера). Сечение реакции  ${}^1_1\mathrm{H}(\mathsf{n},\gamma){}^2_1\mathrm{H}$  намного меньше сечения реакции  ${}^{14}_7\mathrm{N}(\mathsf{n},\mathsf{p}){}^{14}_6\mathrm{C}$ : в диапазоне энергий нейтронов от  $10^{-5}$  эВ приблизительно до  $100~\mathrm{k}$ эВ отношение сечения реакции  ${}^{14}_7\mathrm{N}(\mathsf{n},\mathsf{p}){}^{16}_6\mathrm{C}$  к сечению реакции  ${}^1_1\mathrm{H}(\mathsf{n},\gamma){}^2_1\mathrm{H}$  составляет  $\approx 5-10$ , а при более высоких энергиях достигает сотен [85]. Следовательно, захват нейтронов протонами воды несущественен.

Вклад других производящих углерод реакций на много порядков величины меньше, чем вклад  $^{14}_{7}$ N(n, p) $^{14}_{6}$ C, на который приходится более 99 % полного ТПР в атмосфере Земли [5, с. 673]. Взаимодействиями с кислородом, вторым главным элементом атмосферы, можно также пренебречь из-за слишком низкой концентрации (в 3,25 раз меньше концентрации азота) наряду с тем, что сечения реакций с кислородом, подобных (8), довольно близки или меньше сечений реакций (8). В результате для начального спектра нейтронов (10–16 МэВ) [59] отношение  $\sigma_{abs}/\sigma_{14} \approx 5$ . Нейтроны замедляются в атмосфере; соответственно,  $\sigma_{abs}/\sigma_{14}$  меняется между 5 и 10 в диапазоне энергий от 10 до 1 МэВ; ниже 1 МэВ, где реакция  $^{14}_{7}$ N(n, p) $^{14}_{6}$ C доминирует,  $\sigma_{abs}/\sigma_{14} \approx 1$ .

Значения  $\delta$  наиболее неопределенны. В настоящее время не ясно, генерируются ли нейтроны каждой грозой. Очевидно, количество нейтронов, эмитируемых на один грозовой ЭМИ, может меняться в широком диапазоне. Вероятность обнаружить грозовые нейтроны и числа регистрируемых нейтронов сильно зависят от расстояния от детектора до нейтронного источника, рельефа, влажности воздуха, осадков и т. д. Так, авторы первого сообщения о наблюдении грозовых нейтронов [15] выбрали 124 события с числом зарегистрированных нейтронов 3 и более на фоне 11200 ЭМИ молнии, что дает  $\delta \approx 0,011$ . Включение событий с двумя нейтронами увеличивает  $\delta$  в три раза. С другой стороны, во время наблюдений с 2006 по 2009 гг. Иштиак (Ishtiaq) и др. [20] зарегистрировали события с более чем двумя нейтронами, коррелированные с каждым из зарегистрированных 150 ЭМИ; 19 и 13 из этих событий содержали более чем 5 и более чем 10 нейтро-

нов соответственно. В мае и июне 2006 г., когда грозы проходили около нейтронного монитора, зарегистрированы 60 ЭМИ, из которых 50 коррелированы с событиями, в которых зарегистрировано  $\geq$ 4 нейтронов на событие. В пяти из них были зарегистрированы более 20 нейтронов на событие [30]. Следовательно, согласно этим наблюдениям,  $\delta$  может изменяться приблизительно от 0,01 до 1 в зависимости от числа обнаруженных нейтронов. Согласно обширным экспериментальным данным, собранным с 2009 г., на Арагаце каждая гроза сопровождается грозовыми наземными усилениями (Thunderstorm Ground Enhancements) потоков высокоэнергетических электронов,  $\gamma$ -излучения и нейтронов [20–23]. Энергия  $\gamma$ -фотонов превышает 20 МэВ, что больше порога  $\epsilon_{\text{th,N}} = 10,55$  МэВ [22]. Важно, что грозовые наземные усиления предшествовали каждой вспышке молнии [24]. Следовательно, согласно наблюдениям на Арагаце,  $\delta = 1$ . Поэтому ввиду неопределенности значения  $\delta$  дальнейшие оценки выполняются с  $\delta = 0,01$ , как в [34], и  $\delta = 1$ .

С приведенными значениями  $R_{\rm flash}$ ,  $n_{\rm str}$ ,  $\dot{N}_{\rm cosm}\binom{14}{6}C$ ,  $\delta$  и  $\sigma_{\rm abs}/\sigma_{14}$  для спектров начальных и замедленных нейтронов число нейтронов на удар молнии, необходимое для того, чтобы  $N_{\rm n1}=10$ % (k=0,1) и составляло половину (k=0,5) наблюдаемого ТПР в различных областях земного шара, изменяется согласно данным табл. 1. Заметим, что доля k=0,1 соответствует наблюдаемым колебаниям в производстве  $^{14}_{6}$ С [4, 5 (гл. 17), 7–9, 13].

Таблица 1

Число нейтронов 
$$N_{\rm n1}$$
 на грозовой ЭМИ, необходимое, чтобы ТПР  $\dot{N}_{\rm thund} {14 \choose 6} {\rm C}$  составлял долю  $k$  от наблюдаемого ТПР  $\dot{N}_{\rm cosm} {14 \choose 6} {\rm C} = 2 \cdot 10^4 \ {\rm m}^{-2} \cdot {\rm c}^{-1}$  для  $R_{\rm flash} \approx 3.3 \cdot 10^{-14} - 2.7 \cdot 10^{-12} \ {\rm m}^{-2} \cdot {\rm c}^{-1}$  и  $n_{\rm str} = 1 - 3$ 

k	0,1				0,5			
$n_{ m str}$	1		3		1		3	
$\sigma_{abs}/\sigma_{14}$	1	5	1	5	1	5	1	5
$N_{\rm n1}/10^{15}, \ \delta = 1$ $N_{\rm n1}/10^{17}, \ \delta = 0.01$	61-0,7	305-3,5	20-0,3	102-1,2	305-3,5	1525–18	100-1,5	510-6

Данные наблюдений по первичным вспышкам у-излучения не позволяют вычислить начальные числа нейтронов, поскольку любой эксперимент дает только скорость счета гамма-квантов и энергии на месте расположения детектора, а не числа у-фотонов и спектры на высотах у-источников, но именно последние требуются для вычисления числа нейтронов и их энергий для сравнения с данными табл. 1. Традиционно для получения характеристик импульса фотоядерных нейтронов используется численное моделирование; чтобы вычислить скорость генерации и спектры первичных у-фотонов в источнике, помещаемом на варьируемой высоте, высота подбирается так, чтобы результаты моделирования соответствовали показаниям у-детектора. Чтобы исключить неизбежные неопределенности, присущие такому подходу, разумно оценить флюенс нейтронов, требуемый для того, чтобы грозовой ТПР составлял существенную часть космического ТПР, и сравнить результат непосредственно с флюенсом, полученным по измеренным скоростям счета нейтронов.

# Флюенс нейтронов, необходимый для сопоставления наработки радиоуглерода грозами с наблюдаемой наработкой

Наземный локальный флюенс нейтронов на ЭМИ  $\Phi_{\rm n1}$ , при котором грозовой ТПР  $\dot{N}_{\rm thund} {14 \choose 6} {\rm C}$  составляет часть k от  $\dot{N}_{\rm cosm} {14 \choose 6} {\rm C}$ , оценивается делением (7) на часть площади земной поверхности с высокой грозовой активностью  $S \approx 0,3 \cdot S_{\rm Earth}$ :

$$\Phi_{\rm n1} = \frac{N_{\rm n1}}{S} = \frac{\sigma_{\rm abs}}{\sigma_{\rm 14}} \cdot \frac{k \dot{N}_{\rm cosm} \binom{14}{6} C}{n_{\rm str} R_{\rm flosh} S \delta}.$$
 (9)

В табл. 2 приведены значения  $\Phi_{\rm n1}$ , удовлетворяющие соотношению (9) с k=0,1 и теми же значениями  $\dot{N}_{\rm cosm}{14 \choose 6}$ ,  $\sigma_{\rm abs}/\sigma_{14}$ ,  $R_{\rm flash}$ ,  $n_{\rm str}$  и  $\delta$ , что и в табл. 1. С k=0,5 значения  $\Phi_{\rm n1}$  должны быть соответственно умножены.

Таблица 2 Флюенс нейтронов на грозовой ЭМИ, необходимый для совместимости грозового ТПР с наблюдаемым темпом k=0,1

n <sub>str</sub>	1		3		
$\sigma_{ m abs}/\sigma_{ m 14}$	1	5	1	5	
$\Phi_{n1}, M^{-2}, \delta = 1,$ $\Phi_{n1}/100, M^{-2}, \delta = 0.01$	556-6	2780-30	185-2	925-10	

В табл. 3 представлены значения флюенса нейтронов  $\Phi_n$ , зарегистрированные на различных высотах  $h_{\rm det}$  или полученные численным моделированием в рамках фотоядерного происхождения нейтронов для различных  $h_{\rm det}$  и высот источника первичных  $\gamma$ -лучей  $h_{\gamma}$ . Видно, что с  $\delta=1$  значения  $\Phi_n$  довольно близки или даже превышают оценки в табл. 2. С  $\delta=0.01$  значения  $\Phi_n$  согласуются с оценками табл. 2 для областей с сильной грозовой активностью. Следовательно, возможно, что грозовой ТПР локально составляет существенную часть (по крайней мере, 0.1) космического ТПР.

Заметим, что наблюдения дают значения только локального флюенса нейтронов; невозможно идентифицировать область поверхности Земли, к которой они относятся, потому что ни координаты, ни размеры у-источников неизвестны. Но наблюдения грозовых нейтронов немногочисленны, поэтому данные табл. 3 нельзя полагать близкими к усредненному по земному шару флюенсу нейтронов на один грозовой ЭМИ.

Таблица 3

$h_\gamma$ , км	$h_{ m det}$ ,	Флюенс нейтронов, м $^{-2}$								
		Эксперимент					Расчет			
		[15]	[20]	[30]	[26]	[27]	[59]	[66]	[52]	
?	2,74	30-670		56-700						
?	3,25		$5.10^4$							
15-5	0						$ \begin{array}{c} (0,03-7) \cdot 10^2 \\ (0,35-4) \cdot 10^2 \end{array} $			
12-8	3						$(0,35-4)\cdot 10^2$			
?	3,34					$(2-3)\cdot 10^4$				
4-2	0							$2 \cdot \left(10^3 - 10^5\right)$ $(0,9-2) \cdot 10^7$		
5-3,5	3							$(0,9-2)\cdot 10^7$		
5	0								$3.10^{2}$	
2,5	0								10 <sup>4</sup>	
5,2	4,3				$1,4 \cdot 10^4$					

Наземный флюенс нейтронов  $\Phi_n$  на различных высотах детектирования  $h_{\text{det}}$ 

### Заключение

Вычисленные значения флюенса нейтронов на один грозовой ЭМИ (индикатор глобальной грозовой активности), требуемые для того, чтобы наработка  $^{14}_{6}\mathrm{C}$  грозами в областях с сильной грозовой активностью (частота вспышек молнии  $R_{\mathrm{flash}}10^{-12}~\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{c}^{-1}$ ,  $\delta$  порядка единицы) была сопоставима с наработкой космическим облучением, совместимы с доступными измеренными и вычисленными значениями флюенса грозовых нейтронов. Таким образом, в настоящее время грозовые нейтроны могут локально вносить вклад в концентрацию  $^{14}_{6}\mathrm{C}$ . Авторы работы [34] заключают: «Если бы... некая значительная доля  $^{14}_{6}\mathrm{C}$ , локально депонированная (например, поглощенная местной биомассой) за времена короче по сравнению с временем перераспределения атмосферной циркуляцией, и, учитывая, что молнии концентрируются над сушей и их частота меняется на порядки величины по различным областям, возможно, что, в этих областях наработка  $^{14}\mathrm{C}$  молниями конкурирует с наработкой космическим облучением». Усиление атмосферного потока нейтронов, вызванное грозами, может иметь важные последствия для радиоуглеродной датировки. В частности, грозовые нейтроны могут иметь отношение к аномалиям в радиоуглеродной датировке. Возраст различных материалов может занижаться, если не учитывать историческую частоту и географическое распределение гроз.

Однако в настоящее время доступно только небольшое число сообщений о наблюдении грозовых нейтронов. В большинстве из них только сообщается о наблюдении усилений потока нейтронов, приблизительно коррелированных с ЭМИ молнии, без предоставления численных данных. В настоящее время даже не ясно, генерируются ли нейтроны каждой грозой. Так, авторы первых наблюдений грозовых нейтронов на Высотной научно-исследовательской лаборатории (Галмарг, Кашмир, Индия) выбрали только 124 события с числом нейтронов 3 и более на фоне

11200 ЭМИ молнии [15]. С другой стороны, там же наблюдались усиления потока нейтронов, коррелированные почти с каждым зарегистрированным ЭМИ [30]. Согласно обширным данным наблюдений в Космическом центре Ереванского физического института (Арагац, Армения), ведущихся с 2009 г., нейтроны с энергиями выше фотоядерного порога  $\varepsilon_{\rm th,N}=10,55~{\rm MpB}$  генерируются каждой грозой [22, 24]. Высокоэнергетические явления в грозах — новая и потому слабо разработанная область атмосферного электричества. Число наблюдений коррелированных с грозами импульсов рентгеновского излучения,  $\gamma$ -излучения и нейтронов крайне ограниченно.

Кроме того, как замечает Бронк Рэмси (Bronk Ramsey) [3], глобальный ТПР «известен удивительно плохо». Существенно расхождение между вычисленными и измеренными значениями. Так, Мэк (Mak) и др. [82], измерившие ТПР на различных высотах и широтах, отмечают, что вычисленный ТПР [4] «на низких высотах завышает фактический темп наработки в два раза».

Ввиду важности проблемы требуются более точные и многочисленные экспериментальные исследования электронов высоких энергий, рентгеновского излучения,  $\gamma$ -излучения и нейтронов на различных высотах, долготах и широтах. Было бы крайне интересно измерить наработку  $^{14}_{6}$ С в тропиках, где грозовая активность особенно высока. Интенсивность грозовой активности сильно зависит от активности Солнца, а производство  $^{14}_{6}$ С галактическими космическими лучами в низких широтах почти не зависит от активности Солнца [4, 5 (с. 676)]. Следовательно, если наработка  $^{14}_{6}$ С в тропиках окажется зависящей от солнечной активности, эти дополнительные ядра  $^{14}_{6}$ С, скорее всего, нарабатываются грозами.

## Благодарности

Исследования атмосферного электричества высоких энергий во ВНИИЭФ являются продолжением пионерских исследований высокоэнергетических процессов в экспериментах с лабораторными разрядами в открытой атмосфере и других газах, начатых в конце 1960-х гг. группами Л. В. Тарасовой и Ю. Л. Станкевича [88–95], сотрудничество с которыми в качестве аспиранта и молодого специалиста автор вспоминает с глубокой благодарностью и ностальгией.

Данная статья явилась продолжением исследований, выполненных по проектам МНТЦ № 339, 490, 1480 и 3993. Автор выражает глубокую благодарность S. Gitomer, бывшему научному советнику МНТЦ от США, R. A. Roussel-Dupré, E. M. D. Symbalisty, C. Haldoupis, T. Neubert, коллабораторам от США и ЕС в этих проектах, N. Crosby, S. Cummer, A. van Deursen, J. R. Dwyer, R. Roussel-Dupré, D. Smith, H. Tsuchiya и Е. Williams за поддержку предложения по последнему в программе МНТЦ проекту № 3993. Он искренне благодарен Е. Н. Донскому, А. В. Гуревичу, К. П. Зыбину, И. М. Куцыку, Т. В. Лойко, Б. Н. Шамраеву, С. Haldoupis, Т. Neubert, R. A. Roussel-Dupré, Е. М. D. Symbalisty и другим участникам исследований в этих проектах за многолетнее сотрудничество.

## Список литературы

1. Fleisher R. L., Plumer J. A., Crouch K. Are neutrons generated by lightning? // J. of Geophys. Res. 1974. Vol. 79. P. 5013-5017.

- 2. Libby W. F., Anderson E. C., Arnold J. R. Age determination by radiocarbon content: world-wide assay of natural radiocarbon // Science. 1949. Vol. 109(2827). P. 227–228.
- 3. Bronk Ramsey C. Radiocarbon dating: revolutions in understanding // Archaeometry. 2008. Vol. 50. P. 249-275 [DOI: 10.1111/j.1475-4754.2008.00394.x].
- 4. Lingenfelter R. E. Production of carbon 14 by cosmic ray neutrons // Rev. of Geophysics. 1963. Vol. 1, N 1. P. 35–55.
- 5. Dorman L. Cosmic rays in the Earth's atmosphere and underground. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2004.
- 6. Gosse J., Klein J. Terrestrial cosmogenic nuclide dating // Encyclopedia of Scientific Dating Methods. Springer, 2015. Vol. XXIX. P. 799–813.
- 7. Rakowski A. Z., Krapiec M., Huels M. et al. Increase of radiocarbon concentration in tree rings from Kujawy (SE Poland) AD 774-775 // Nucl. Instrum. Meth. in Phys. Res. B. 2015. Vol. 361. P. 564–568.
- 8. Usoskin I. G., Kromer B., Ludlow F. et al. The AD775 cosmic event revisited: the Sun is to blame // Astron. Astrophys. 2013. Vol. 552. P. L3 [DOI:10.1051/0004-6361/201321080].
- 9. Pavlov, A. K., Blinov A. V., Vasilyev G. I. et al. Gamma-ray bursts and the production of cosmogenic radionuclides in the Earth's attmosphere // Astronomy Lett. 2013. Vol. 39, Issue 9. P. 571–579.
- 10. Wilson C. T. R. The acceleration of  $\beta$ -particles in strong electric fields such as those of thunderclouds // Proc. Cambridge Phil. Soc. 1924. Vol. 22. P. 534–538.
- 11. Eddington A. S. The origin of stellar energy // Supplement to Nature. 1926. N 2948. P. 25.
- 12. Libby L. M., Lukens H. R. Production of radiocarbon in tree rings by lightning bolts // J. of Geophys. Res. 1973. Vol. 78. P. 5902.
- 13. Suess H. E. Secular variations of cosmic ray produced carbon 14 in the atmosphere and their interpretations // J. of Geophys. Res. 1965. Vol. 70. P. 5437–5452.
- 14. Fleisher R. L. Search for neutron generation by lightning // J. of Geophys. Res. 1975. Vol. 80. P. 5005.
- 15. Shah G. N., Razdan H., Bhat G. L., Ali G. M. Neutron generation in lightning bolts // Nature. 1985. Vol. 313. P. 773–775.
- 16. Shyam A. N., Kaushik T. C. Observation of neutron bursts associated with atmospheric lightning discharge // J. of Geophys. Res. 1999. Vol. 104. P. 6867–6869.
- 17. Кужевский Б. М. Генерация нейтронов в молниях // Вестник Московского университета. 2004. Серия 3. Физика. Астрономия. № 5. С. 14-16.
- 18. Bratolyubova-Tsulukidze L. S., Grachev E. A., Grigoryan O. R. et al. Thunderstorms as the probable reason of high background neutron fluxes at L < 1.2 // Adv. Space Res. 2004. Vol. 34. P. 1815–1818.
- 19. Martin I. M., Alves M. A. Observation of a possible neutron burst associated with a lightning discharge // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A00E11 [DOI:10.1029/2009JA014498].
- 20. Chilingarian A., Daryan A., Arakelyan K. et al. Ground-based observations of thunderstorm-correlated fluxes of high-energy electrons, gamma rays, and neutrons // Phys. Rev. D. 2010. Vol. 82. P. 043009 [DOI:10.1103/PhysRevD.82.043009].
- 21. Chilingarian A., Bostanjyan N., Vanyan L. Neutron bursts associated with thunderstorms // Phys. Rev. D. 2012. Vol. 85. P. 085017 [DOI:10.1103/PhysRevD.85.085017].

- 22. Chilingarian A., Hovsepyan G., Kozliner L. Thunderstorm ground enhancements: gamma ray differential energy spectra // Phys. Rev. D: Part. Fields. 2013. Vol. 88. P. 073001.
- 23. Chilingarian A., Hovsepyan G., Mantasakanyan E. Mount Aragats as a stable electron accelerator for atmospheric high-energy physics research // Phys. Rev. D: Part. Fields. 2016. Vol. 93. P. 052006.
- 24. Chilingarian A., Chilingaryan S., Karapetyan T. et al. On the initiation of lightning in thunderclouds // Scientific Repots. 2017. Vol. 7. P. 1371 [DOI:10.1038/s41598-017-01288-0].
- 25. Starodubtsev S. A., Kozlov V. I., Toropov A. A. et al. First experimental observations of neutron splashes under thunderclouds near the sea level // JETP Lett. 2012. Vol. 96. P. 188–191.
- 26. Tsuchiya H., Hibino K., Kawata K. et al. Observation of thundercloud-related gamma-rays and neutrons in Tibet // Phys. Rev. D. 2012. Vol. 85. P. 092006 [DOI:10.1103/PhysRevD.85.092006].
- 27. Gurevich A. V., Antonova V. P., Chubenko A. P. et al. Strong flux of low-energy neutrons by thunderstorms // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. P. 125001 [DOI:10.1103/PhysRevLett.108].
- 28. Gurevich A. V., Antonova V. P., Chubenko A. P. et al. The time structure of neutron emission during atmospheric discharge // Atmos. Res. 2015. Vol. 164–165. P. 339–346.
- 29. Gurevich A. V., Almenova A. M., Antonova V. P. et al. Observations of high-energy radiation during thunderstorms Antonova at Tien-Shan // Phys. Rev. D. 2016. Vol. 94. P. 023003-1–023003-12.
- 30. Ishtiaq P. M., Mufti S., Darzi M. A. et al. Observation of 2.45 MeV neutrons correlated with natural atmospheric lightning discharges by Lead-Free Gulmarg Neutron Monitor // J. of Geophys. Res. Atmosphere. 2016. Vol. 121. P. 692–703 [DOI:10.1002/2015JD023343].
- 31. Kuroda Y., Oguri S., Kato Y. et al. Observation of gamma-ray bursts at ground level under the thunderclouds [Electronic resourse]. https://ArXiv:1601.06349v2 [astro-ph.HE]. 26 Jan. 2016.
- 32. Babich L. P. Generation of neutrons in giant upward atmospheric discharges // JETP Lett. 2006. Vol. 84. P. 285–288 [DOI:10.1134/S0021364006180020].
- 33. Babich L. P. Mechanism of neutron generation correlated with lightning discharges // Geomagnetism and Aeronomy. 2007. Vol. 47. N 5. P. 664–670.
- 34. Babich L. P., Roussel-Dupré R. A. The origin of neutron flux increases observed in correlation with lightning // J. of Geophys. Res. 2007. Vol. 112. P. D13303 [DOI:10.1029/2006JD008340].
- 35. Babich L. P. Fundamental processes capable of accounting for the neutron flux enhancements in thunderstorm atmosphere // JETP. 2014. Vol. 118. P. 375–383 [DOI:10.1134/S1063776114030017].
- 36. Babich L. P., Bochkov E. I., Kutsyk I. M., Rassoul H. K. Analysis of fundamental interactions capable of producing neutrons in thunderstorm atmosphere // Phys. Rev. D. 2014. Vol. 89. P. 093010 [DOI: dx.DOI.org/10.1103/PhysRevD.89.093010].
- 37. Fishman G. J., Bhat P. N., Mallozzi R. et al. Discovery of intense gamma-ray flashes of atmospheric origin // Science. 1994. Vol. 264. P. 1313–1316.
- 38. Smith D. M., Lopez L. I., Lin R. P., Barrington-Leigh C. P. Terrestrial gamma-ray flashes observed up to 20 MeV // Science. 2005. Vol. 307. P. 1085–1088.
- 39. Briggs M. S., Fishman G. J., Connaughton V., Bhat P. N. et al. First results on terrestrial gamma-ray flashes from the Fermi gamma-ray burst monitor  $/\!/$  J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A07323 [DOI:10.1029/2009JA015242].

- 40. Connaughton V., Briggs M. S., Holzworth R. H. et al. Associations between Fermi Gamma-ray Burst Monitor terrestrial gamma-ray flashes and sferics from the World Wide Lightning Location Network // J. of Geophys. Res. 2011. Vol. 115. P. A12307 [DOI:10.1029/2010JA015681].
- 41. Marisaldi M., Fuschino F., Labanti C. et al. Detection of terrestrial gamma-ray flashes up to 40 MeV by the AGILE satellite // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115, Issue A3. P. A00E13 [DOI:10.1029/2009JA014502].
- 42. Marisaldi M., Argan A., Trois A. et al. Gamma-ray localization of terrestrial gamma-ray flashes // Phys. Rev. Lett. 2010. Vol. 105. P. 128501 [DOI:10.1103/PhysRevLett.105,128501].
- 43. Tavani M., Marisaldi M., Labanti C. et al. Terrestrial gamma-ray flashes as powerful particle accelerators // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 106. P. 018501.
- 44. Smith D. M., Dwyer J. R., Hazelton B. J. et al. A terrestrial gamma-ray flash observed from an aircraft // J. of Geophys. Res. 2011. Vol. 116. P. D20124 [DOI:10.1029/2011JD016252].
- 45. Tran M. D., Rakov V. A., Mallick S. et al. A terrestrial gamma-ray flash recorded at the Lightning Observatory in Gainesville, Florida // J. Atmos. Sol. Terr. Phys. 2015. Vol. 136. P. 86–93 [DOI:10.1016/j.jastp.2015.10.010].
- 46. Enoto T., Wada Y., Furuta Y. et al. Photonuclear reactions triggered by lightning discharge // Nature. 2017. Vol. 551. P. 481–484 [DOI:10.1038/nature24630].
- 47. Khaerdinov N. S., Lidvansky A. S., Petkov V. B. Cosmic rays and the electric field of thunderclouds: Evidence for acceleration of particles (runaway electrons) // Atmos. Res. 2005. Vol. 76. P. 246.
- 48. Torii T., Sugita T., Tanabe S. Gradual increase of energetic radiation associated with thunderstorm activity at the top of Mt. Fuji // Geophys. Res. Lett. 2009. Vol. 36. P. L13804 [DOI:10.1029/2008GL037105].
- 49. Tsuchiya H., Enoto T., Yamada S. et al. Detection of high-energy gamma-rays from winter thunder-clouds // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. P. 165002 [DOI:10.1103/PhysRevLett.99.165002].
- 50. Tsuchiya H., Enoto T., Torii T. et al. Observation of an energetic radiation burst from mountain-top thunderclouds // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. P. 255003 [DOI:10.1103/PhysRevLett.102.255003].
- 51. Tsuchiya H., Enoto T., Yamada S. et al. Long-duration γ-ray emissions from 2007 and 2008 winter thunderstorms // J. of Geophys. Res. 2011. Vol. 116. P. D09113 [DOI:10.1029/2010JD015161].
- 52. Carlson B. E., Lehtinen N. G., Inan U. S. Neutron production in terrestrial gamma ray flashes // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A00E19 [DOI:10.1029/2009JA014696].
- 53. Gurevich A. V., Milikh G. M., Roussel-Dupre R. A. Runaway electron mechanism of air breakdown and preconditioning during a thunderstorm // Phys. Lett. A. 1992. Vol. 165. P. 463–468 [DOI:10.1016/0375-9601(92)90348-P].
- 54. Dwyer J. R. Source mechanisms of terrestrial gamma-ray flashes // J. of Geophys. Res. 2008. Vol. 113. P. D10103 [DOI:10.1029/2007JD009248].
- 55. Dwyer J. R., Smith D. M., Cummer S. A. High-energy atmospheric physics: terrestrial gamma-ray flashes and related phenomena // Space Sci. Rev. 2012 [DOI:10.1007/s11214-012-9894-0].
- 56. Kutsyk I. M., Babich L. P., Donskoy E. N., Bochkov E. I. Numerical analysis of the concept of a laboratory experiment on the demonstration of runaway electron breakdown under normal conditions at high overvoltages // JETP Lett. 2012. Vol. 95. P. 631–636.

- 57. Kutsyk I. M., Babich L. P., Donskoy E. N., Bochkov E. I. Analyses of a laboratory experiment on the observation of runaway electron avalanche in air at high overvoltages // Plasma Phys. Report. 2012. Vol. 38. P. 891–898.
- 58. Физическая энциклопедия / Под ред. А. М. Прохорова. М.: Советская энциклопедия, 1988. Т. 1.
- 59. Babich L. P., Bochkov E. I., Kutsyk I. M., Roussel-Dupre R. A. Localization of the source of terrestrial neutron bursts detected in thunderstorm atmosphere // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A00E28 [DOI:10.1029/2009JA014750].
- 60. Cummer S. A., Zhai Y., Hu W. et al. Measurements and implications of the relationship between lightning and terrestrial gamma-ray flashes // Geophys. Res. Lett. 2005. Vol. 32. P. L08811 [DOI:10.1029/2005GL022778].
- 61. Cummer S. A., Lu G., Briggs M. S. et al. The lightning-TGF relationship on microsecond timescales // Geophys. Res. Lett. 2011. Vol. 38. P. L14810 [DOI:10.1029/2011GL048099].
- 62. Kelley N. A., Smith D. M., Dwyer J. R. et al. Relativistic electron avalanches as a thunderstorm discharge competing with lightning // Nature Commun. 2015. Vol. 6:7845. P. 1–7 [DOI:10.1038/ncomms8845].
- 63. Dwyer J. R., Grefenstette B. W., Smith D. M. High-energy electron beams launched into space by thunderstorms // Geophys. Res. Lett. 2008. Vol. 35. P. L02815 [doi:10.1029/2007GL032430].
- 64. Babich L. P., Kudryavtsev A. Yu., Kudryavtseva M. L., Kutsyk I. M. Terrestrial gamma-ray flashes and neutron pulses from direct simulations of gigantic upward atmospheric discharge // JETP Lett. 2007. Vol. 85. P. 483–487 [DOI: 10.1134/S0021364007100037].
- 65. Babich L. P., Kudryavtsev A. Yu., Kudryavtseva M. L., Kutsyk I. M. Atmospheric gamma-ray and neutron flashes // JETP. 2008. Vol. 106. P. 65–76.
- 66. Babich L. P., Bochkov E. I., Donskoy E. N., Kutsyk I. M. Source of prolonged bursts of high-energy gamma-rays detected in thunderstorm atmosphere in Japan at the coastal area of the Sea of Japan and on high mountain top // J. of Geophys. Res. 2010. Vol. 115. P. A09317 [DOI:10.1029/2009JA015017].
- 67. Babich L. P., Bochkov E. I., Kutsyk I. M., Zalyalov A. N. On amplifications of photonuclear neutron flux in thunderstorm atmosphere and possibility of detecting them // JETP Lett. 2013. Vol. 97 P. 291–296 [DOI:10.1134/S0021364013060027].
- 68. Babich L. P., Bochkov E. I., Dwyer J. R. et al. Numerical analysis of 2010 high-mountain (Tien-Shan) experiment on observations of thunderstorm-related low-energy neutron emissions // J. of Geophys. Res. Space Phys. 2013. Vol. 118. P. 7905–7912 [DOI:10.1002/2013JA019261].
- 69. Celestin S., Xu W., Pasko V. P. Terrestrial gamma ray flashes with energies up to 100 M<sub>3</sub>B produced by nonequilibrium acceleration of electrons in lightning // J. of Geophys. Res. 2012. Vol. 117. P. A05315 [DOI:10.1029/2012JA017535].
- 70. Xu W., Celestin S., Pasko V. P. Source altitudes of terrestrial gamma-ray flashes produced by lightning leaders // Geophys. Res. Lett. 2012. Vol. 39. P. L08801 [DOI:10.1029/2012GL051351].
- 71. Christian H., Latham J. Satellite measurements of global lightning // Q. J. R. Meteorol. Soc. 1998. Vol. 124. P. 1–1773.
- 72. Christian H., Blakeslee R., Boccippio D. et al. Global frequency and distribution of lightning as observed from space by the optical transient detector // J. of Geophys. Res. 2003. Vol. 108. P. 4005.

- 73. Ushio T. Lightning observation by the LIS aboard the TRMM satellite // Japan Earth and Planetary Science Joint Meeting. Makuhari, Chiba, 2003. Abstract E024-012.
- 74. Sato M., Takahashi M. Y., Yoshida A., Adachi T. Global distribution of intense lightning discharges and their seasonal variations // J. Phys. D: Appl. Phys. 2008. Vol. 41. P. 234011 (10pp) [DOI:10.1088/0022-3727/41/23/234011].
- 75. Bazelyan E. M., Rizer Y. P. Lightning physics and lightning protection. Bristol: IOP Publishing, 2000.
- 76. Rakov V. A., Uman M. A. Lightning physics and effects. New York: Cambridge Univ. Press, 2003.
- 77. Damon P. E., Lerman J. C., Long A. Temporal fluctuations of atmospheric <sup>14</sup>C // Ann. Rev. Earth Planets. Sci. 1978. Vol. 6. P. 457–494.
- 78. O'Brien K., Sandmeier H. A., Hansen G. E., Campbell J. E. Cosmic ray induced neutron background sources and fluxes for geometries of air over water, ground, iron, and aluminum // J. of Geophys. Res. 1978. Vol. 83. P. 114.
- 79. Masarik J., Reedy R. C. Terrestrial cosmogenic nuclide production calculated from numerical simulations // Earth Planet. Sci. Lett. 1995. Vol. 136. P. 381–396.
- 80. Bronk Ramsey C., Brenninkmeijer C. A. M., Jockel P. et al. Direct measurement of the radiocarbon production at altitude // Nucl. Instrum. Meth. in Phys. Res. B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2007. Vol. 259(1). P. 558–564.
- 81. Poluyanov S., Kovaltsov G. A., Mishev A. L., Usoskin I. G. Production of cosmogenic isotopes <sup>7</sup>Be, <sup>10</sup>Be, <sup>14</sup>C, <sup>22</sup>Na and <sup>36</sup>Cl in the atmosphere: Altitudinal profiles of yield functions [Electronic resourse]. https://arxiv.org/abs/1606.05899v1[astro-phAP].
- 82. Mak J. E., Brenninkmeijer C. A. M., Southon J. R. Direct measurement of the production rate of  ${}^{14}_{6}$ C near Earth's surface // Geophys. Res. Lett. 1999. Vol. 26. P. 3381.
- 83. Kanu A. M., Comfort L. L., Guilderson T. P. et al. Measurements and modeling of contemporary radiocarbon in the stratosphere // Geophys. Res. Lett. 2016. Vol. 43(3). P. 1399–1406 [DOI:10.1002/2015GL066921].
- 84. Babich L. P., Donskoy E. N., Kutsyk I. M., Roussel-Dupré R. A. Bremsstrahlung of relativistic electron avalanche in the atmosphere // Geomagnetism and Aeronomy. 2004. Vol. 44. P. 254.
- 85. Официальный сайт МАГАТЭ [Электронный ресурс]. https://www-nds.iaea.org/exfor/endf.htm.
- 86. Шишкин Н. С. Облака, осадки и грозовое электричество. Л.: Гидрометеоиздат, 1964.
- 87. McCarthy M., Parks G. K. On the modulation of X-ray fluxes in thunderstorms // J. of Geophys. Res. 1992. Vol. 97. P. 5857–5864.
- 88. Станкевич Ю. Л., Калинин В. Г. Быстрые электроны и рентгеновское излучение в начальной стадии развития импульсного искрового разряда в воздухе // ДАН СССР. 1967. Т. 39. С. 72–73.
- 89. Тарасова Л. В., Худякова Л. Н. Рентгеновское излучение при импульсных разрядах в воздухе // ЖТФ. 1969. Т. 39. С. 1530-1533.
- 90. Станкевич Ю. Л. Начальная стадия электрического разряда в плотных газах // ЖТФ. 1970. Т. 40. С. 1476.
- 91. Бабич Л. П. Тормозное излучение электронов в средах с внешним электрическим полем //  $\mathbb{K}$  ТФ. 1972. Т. 42. С. 1617—1619.

- 92. Бабич Л. П., Станкевич Ю. Л. Критерий перехода от стримерного механизма газового разряда к непрерывному ускорению электронов // ЖТФ. 1972. Т. 42. С. 1669–1673.
- 93. Бабич Л. П. О стохастическом ускорении электронов в наносекундных разрядах // ЖТФ. 1974. Т. 44. C. 1846 1851.
- 94. Тарасова Л. В., Худякова Л. Н., Лойко Т. В., Цукерман В. А. Быстрые электроны и рентгеновское излучение наносекундных импульсных разрядов в газах при давлениях 0,1–760 Торр // ЖТФ. 1974. Т. 44. С. 564.
- 95. Бабич Л. П., Лойко Т. В., Тарасова Л. В., Цукерман В. А. О природе рентгеновского излучения и быстрых электронов наносекундных газовых разрядов // Письма в ЖТФ. 1975. Т. 1. С. 166–169.

# **Radiocarbon Production by Thunderstorms**

## L. P. Babich

In view of the neutron flux enhancements observed in thunderstorm times, a contribution of thunderstorm neutrons to atmospheric radiocarbon production is analyzed. Herein, estimates of neutron fluence per lightning EMP in regions with severe thunderstorm activity, at which a local rate of the radiocarbon production is comparable to the observational data, are consistent with the measured magnitudes of thunderous neutron fluence. Available observational data on atmospheric neutron and parent gamma-ray flashes correlated with thunderstorms do not allow making final conclusions about thunderstorm contributions to the radiocarbon production. For this, numerous studies of high-energy phenomena in thunderstorms are required, especially in the tropical belt where the thunderstorm activity is especially severe and where the radiocarbon production by galactic cosmic rays is almost independent of the solar activity disturbing the geomagnetic field shielding the Earth from cosmic radiation.

# СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛА 6

Деменкова Э. А., Зарецкии Н. А., Федоркин О. О., Щуров В. В.	
Исследование спектрально-временного распределения	
энергии генерации электроразрядного HF/DF-лазера	292

ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ

УДК 621.375.826

DOI: 10.53403/9785951504937 2020 25.1 292 301

# Исследование спектрально-временного распределения энергии генерации электроразрядного HF/DF-лазера

Э. А. Деменкова, Н. А. Зарецкий, О. О. Федоркин, В. В. Щуров

Детально изучены спектрально-временные параметры излучения электроразрядного HF/DF-лазера. Определена зависимость энергии и мощности лазерного импульса от времени. Зарегистрированы интегральный спектральный состав излучения и состав излучения в различные моменты лазерного импульса. Определена задержка начала излучения на разных переходах относительно начала лазерного импульса. Установлено, что длительность импульса излучения отдельной спектральной линии зависит в первую очередь от вращательного квантового числа и практически не зависит от колебательного квантового числа.

Уникальный спектр излучения HF/DF-лазера, состоящий из нескольких десятков отдельных спектральных линий, позволяет рассматривать такой лазер для мониторинга атмосферы. Эффективным методом измерения концентрации углеводородов в воздухе является бесконтактный метод дифференциального поглощения с использованием лазерного источника.

Для дальнейшего совершенствования методов применения химических лазеров в области мониторинга атмосферы важно иметь полное представление о богатом спектральном составе излучения HF/DF-лазера, в том числе изучить распределение во времени отдельных спектральных линий HF/DF-лазера.

Изучение спектрального состава излучения электроразрядного химического лазера с неустойчивым резонатором (коэффициент увеличения телескопа M=2,5) проводилось по схеме, представленной на рис. 1 [1].

Типичные интегральные импульсы мощности излучения HF- и DF-лазеров и распределение энергии импульсов во времени показаны на рис. 2.

Видно, что при общей длительности лазерного импульса порядка 500 нс (по уровню 0,1 интенсивности) 80 % энергии выделяется за время порядка 300 нс.

В целом форма лазерных импульсов практически идентична. Длительность импульсов по уровню 0,1 максимальной амплитуды составляет для HF-лазера  $t_{0,1}^{\rm HF} \approx 480$  нс, для DF-лазера  $t_{0,1}^{\rm DF} \approx 460$  нс, но по полувысоте импульс излучения HF-лазера длиннее примерно на 50 нс.

<sup>©</sup> Вестник воздушно-космической обороны. 2017. № 4(16). С. 38–45.

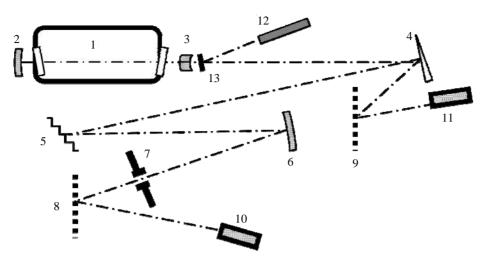


Рис. 1. Схема измерений спектрального состава излучения: 1 – лазер; 2, 3 – зеркала резонатора; 4 – клин из CaF<sub>2</sub>; 5 – реплика дифракционной решетки 100 штр./мм; 6 – зеркало сферическое; 7 – щелевая диафрагма шириной 3 мм; 8, 9 – диффузно-рассеивающие экраны; 10, 11 – измерители формы лазерного импульса; 12 – юстировочный лазер, λ = 0,527 мкм; 13 – поворотное зеркало

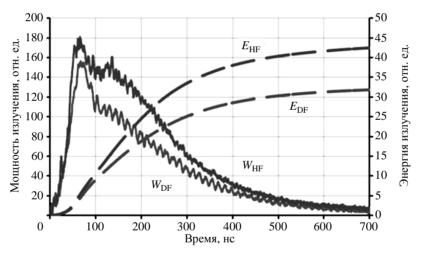


Рис. 2. Распределение мощности и энергии импульса лазера во времени

Мощность импульса рассчитывалась по формуле [2]

$$W = \sum_{i=1}^{N} \frac{W_i}{N}.$$
 (1)

Для HF-лазера  $W_{\rm HF} \approx 83$  отн. ед., для DF-лазера  $W_{\rm DF} \approx 64$  отн. ед. Пиковые мощности в отдельные моменты времени гораздо выше.

Измерение распределения энергии по длинам волн проведено по схеме рис. 1.

Вначале была проведена идентификация спектральных линий. Типичные регистрограммы ожогов на экране, соответствующих отдельным спектральным линиям, представлены на рис. 3. Линиями отмечено положение порядков отражения дифракционной решетки. Отсюда определился масштаб, равный 3,05 нм/мм, что позволило идентифицировать спектральные линии.

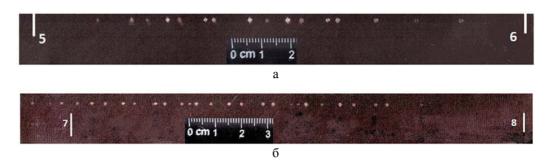


Рис. 3. Регистрограмма линий излучения на термоэкране: а – HF-лазер, б – DF-лазер

В спектре излучения HF-лазера экспериментально обнаружены 16 линий, в спектре излучения DF-лазера – 28 линий разной интенсивности в четырех колебательных полосах.

Далее измерялась энергия отдельных спектральных линий.

При обработке данных в экспериментах с HF-лазером наряду с ослаблением оптической схемы учитывалось поглощение линий парами воды, содержащимися в атмосфере. Данные по коэффициентам поглощения отдельных линий были взяты из базы данных Hitran.

Спектральный состав излучения HF- и DF-лазеров представлен на рис. 4.

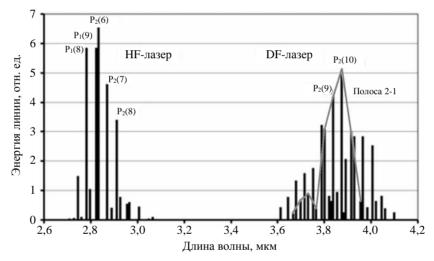


Рис. 4. Спектральный состав излучения HF- и DF-лазеров

Линии излучения DF-лазера лежат в спектральной области от 3,6 до 4,1 мкм. Наиболее энергетичной является полоса 2–1, в ней сосредоточено 42,6 % всей лазерной энергии. В этой же полосе находятся и наиболее сильные линии излучения  $P_2(9)$  и  $P_2(10)$ , на них приходится свыше 20 % энергии. Линии излучения HF-лазера лежат в спектральной области от 2,6 до 3,1 мкм. Основная энергия генерации ( $\approx$ 82 %) сосредоточена в пяти линиях  $P_1(8)$ ,  $P_1(9)$ ,  $P_2(6)$ ,  $P_2(7)$ ,  $P_2(8)$ , находящихся в спектральном диапазоне от 2,78 до 2,91 мкм [3]. По данным исследований можно построить график распределения энергии по спектральным областям (рис. 5).

С помощью измерителя зарегистрированы формы лазерных импульсов на всех колебательно-вращательных переходах HF- и DF-лазеров.

Сигнал напряжения с датчика записывался на осциллограф TDS и оцифровывался. Так как энергия линии есть интеграл от мощности по времени, то несложно перевести значения напряжения в мощность, зная энергию линии.

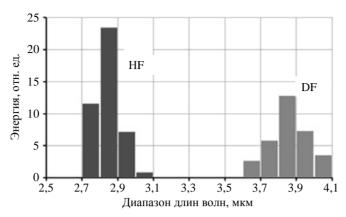


Рис. 5. Распределение энергии HF- и DF-лазеров по спектральным областям

Некоторые импульсы имеют по два и даже три максимума. Это связано с тем, что в щелевую диафрагму помимо излучения измеряемой линии попадает часть излучения от других близко расположенных линий. Например, линии  $P_1(12)$ ,  $P_2(9)$  и  $P_3(5)$  находятся очень близко, длины их волн отличаются не более чем на 0,009 мкм, поэтому спектрально разделить их не удается. Так как в щелевую диафрагму попадает спектральный интервал 0,009 мкм, то ясно, что «крылья» соседних линий могут фиксироваться на осциллограмме.

Отметим, что одновременно с формой импульса на отдельном переходе другим приемником регистрировался общий импульс излучения лазера. Это позволило определить задержку каждой спектральной линии относительно общего импульса. На рис. 6 приведено время задержки генерации на переходах для разных колебательных полос и вращательных квантовых чисел. Точность определения временных параметров оценивается как  $\pm 10$  нс.

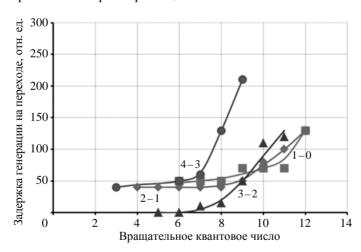


Рис. 6. Зависимость времени задержки генерации излучения на переходах для различных вращательных квантовых чисел j молекулы DF

Из рисунка видно, что генерация начинается на переходах полосы 3–2 при малых вращательных квантовых числах. С ростом вращательного квантового числа время задержки увеличивается. Такая картина характерна для всех колебательных полос.

Длительность импульсов генерации на разных колебательно-вращательных переходах приведена на рис. 7.

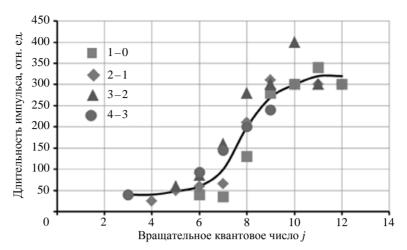


Рис. 7. Зависимость длительности импульса генерации по уровню 0,5 амплитуды для различных вращательных квантовых чисел i молекулы DF

Обращает на себя внимание тот факт, что длительность импульса генерации зависит лишь от вращательного квантового числа и практически не зависит от колебательного квантового числа. Знание временных параметров импульсов генерации на всех переходах позволило определить изменение спектра излучения DF-лазера в различные моменты времени. Мгновенные спектры излучения представлены на рис. 8. Видно, что наиболее богатый спектр наблю-дается в начале лазерного импульса.

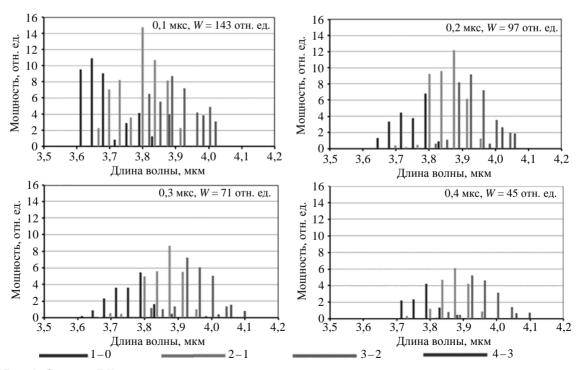


Рис. 8. Спектры DF-лазера в разные моменты времени относительно начала импульса генерации

Зависимость мощности спектральных линий от вращательного квантового числа в пределах отдельных колебательных полос приведена на рис. 9, цифры у линий – время в микросекундах.

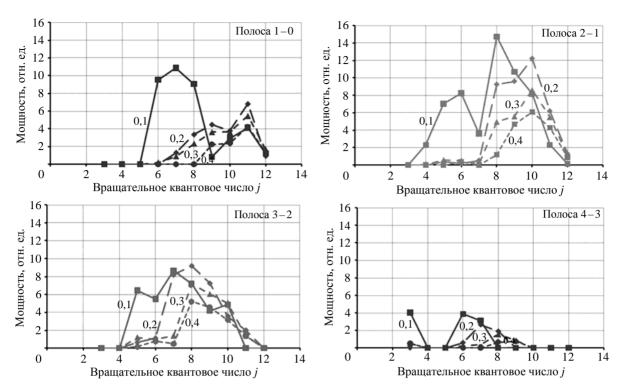


Рис. 9. Зависимость мощности спектральных линий DF-лазера от вращательного квантового числа в различные моменты времени

Если просуммировать мощность линий с одинаковым вращательным квантовым числом в различные моменты времени, то получим картину, представленную на рис. 10 (цифры у линий – время в микросекундах). Видно, что со временем максимум энерговыделения смещается в сторону больших значений *j*.

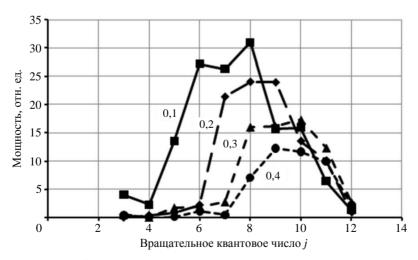


Рис. 10. Зависимость суммарной мощности линий с одинаковым j от вращательного квантового числа в различные моменты времени

На рис. 11, 12 приведены время задержки и длительность генерации на переходах для разных колебательных полос и вращательных квантовых чисел HF-лазера.

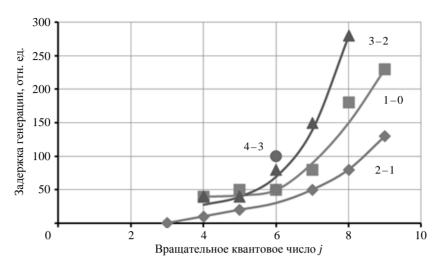


Рис. 11. Зависимость времени задержки генерации излучения на переходах HF-лазера от вращательного квантового числа i

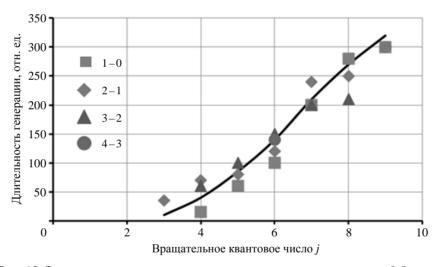


Рис. 12. Зависимость длительности генерации излучения по уровню 0,5 амплитуды на переходах HF-лазера от вращательного квантового числа j

Как и для DF-лазера, время задержки генерации растет с увеличением j, но генерация начинается на полосе 2-1. Длительность генерации определяется в основном вращательным квантовым числом и практически не зависит от колебательного квантового числа.

Мгновенный спектр излучения HF-лазера в различные моменты времени представлен на рис. 13.

Наиболее богатый спектр излучения приходится на 0,1 мкс после начала лазерного импульса.

Зависимость мощности спектральных линий от вращательного квантового числа в пределах отдельных колебательных полос представлена на рис. 14. Так как в полосе 4–3 находится лишь одна линия, то данные по ней не приводятся.

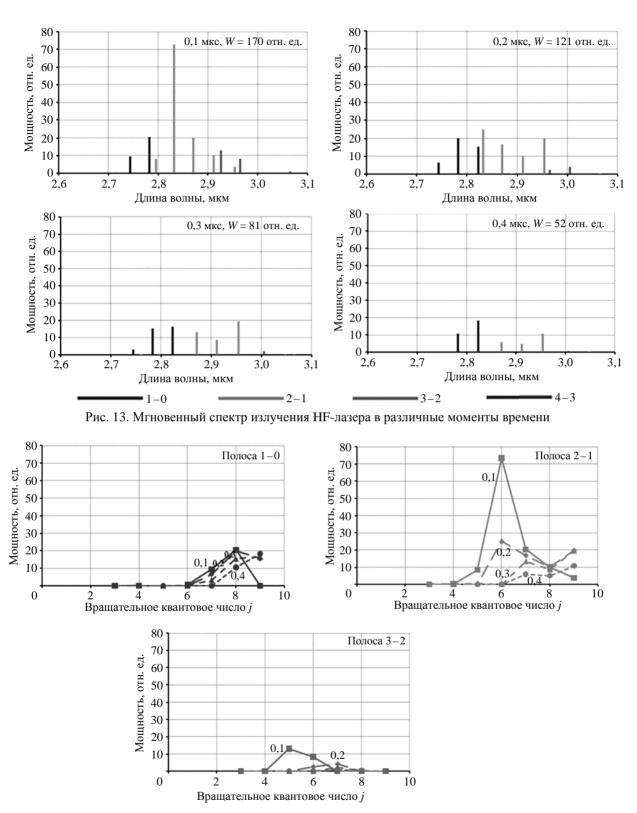


Рис. 14. Зависимость мощности спектральных линий НГ-лазера от вращательного квантового числа *j* 

Если в различные моменты времени просуммировать мощности линий с одинаковым вращательным квантовым числом, то получим картину, представленную на рис. 15. Видно, что со временем максимум в полосе сдвигается в сторону больших вращательных чисел.

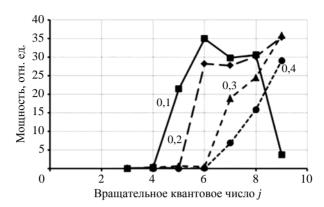


Рис. 15. Зависимость суммарной мощности линий с одинаковым j от вращательного квантового числа в различные моменты времени

На рис. 16 представлены интегральные формы импульсов HF- и DF-лазеров. Видно хорошее совпадение суммарных по всем линиям и экспериментальных форм импульсов.

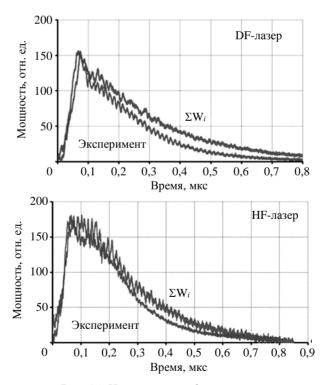


Рис. 16. Интегральные формы импульсов

# Выводы

Детально изучены спектрально-временные параметры излучения электрораз-рядного HF/DF-лазера. Определена зависимость энергии и мощности лазерного импульса от времени. Показано, что в первые 0,3 мкс выделяется до 80 % общей энергии.

Зарегистрированы интегральный спектральный состав излучения и состав излучения в различные моменты лазерного импульса.

Определена задержка начала генерации на разных переходах относительно начала лазерного импульса. Показано, что для HF-лазера генерация начинается на переходах полосы 2-1 при малых вращательных квантовых числах j, для DF-лазера генерация начинается на переходах полосы 3-2. С ростом квантового числа j задержка увеличивается.

Длительность импульса излучения отдельной спектральной линии зависит в первую очередь от вращательного квантового числа и практически не зависит от колебательного квантового числа.

# Список литературы

- 1. Ананьев Ю. А. Оптические резонаторы и проблема расходимости лазерного излучения. М., 1979.
- 2. Степанов Б. Н. Методы расчета оптических квантовых генераторов. Минск, 1966.
- 3. Гросс Р., Ботт Д. Химические лазеры. М., 1980.

# Research of Spectral Time Distribution of Generation Energy of an Electric-Discharge HF/DF-Laser

E. A. Demenkova, N. A. Zaretsky, O. O. Fedorkin, V. V. Shchurov

This paper provides thorough study of spectral time parameters of electric-discharge HF/DF-laser emission. The dependence of laser pulse energy and power on time has been obtained. Both integrated laser spectra and emission composition at different moments of a laser pulse have been registered. The delay of emission onset at different junctions with respect to the onset of a laser pulse has been obtained. Emission pulse width of a particular spectral line depends primarily on rotational quantum number and doesn't depend practically on vibrational quantum number.

# АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абрамов Н. А. 188 Андреюк Н. А. 162 Артемова Е. О. 44

Бабич Л. П. 226, 242, 274 Бахаев А. Н. 28 Борисенко О. Н. 88 Борляев В. В. 44

Воропинов А. А. 120

Бутнев О. И. 28

Генералов Л. Н. 206, 216 Георгиевская А. Б. 138 Гиниятуллина А. Г. 88 Глинский М. Л. 28 Голубев А. И. 162 Горбатенко М. В. 6 Горев И. В. 28 Гриневич Б. Е. 226 Гусарова Е. В. 172

Деменкова Э. А. 292 Дьянов Д. Ю. 44

Егужова М. Ю. 56

Жеребцов В. А. 206, 216 Журавлева М. В. 28

Залялов А. Н. 80 Зарецкий Н. А. 292

Ивановский А. В. 226

Казанцев А. В. 44 Колесников С. С. 28 Королев В. Ю. 172 Краев А. И. 226 Краюхин А. А. 56 Куваев А. А. 28 Куделькин В. Б. 226 Кузьменко М. В. 88 Куканов С. С. 44

Лазарев А. А. 68 Лазарев В. В. 108 Лысова Е. Н. 28

Машенькин П. А. 28 Медведкина М. В. 44

Наумова Е. И. 44

Пикулина Г. Н. 198 Полищук С. Н. 68 Попова Н. В. 88 Потехин Е. В. 88 Пронин В. А. 28 Пятаков Н. П. 162

Раевский В. А. 138 Романов В. И. 44 Рябов А. А. 44

Селезенев А. А. 172, 188 Селянкина С. М. 216 Семенов М. Е. 28 Сидоров М. Л. 28 Скляров А. В. 188 Смолкина Д. Н. 88 Соколов С. С. 120 Спиридонов В. Ф. 44 Стадник А. Л. 56 Стародубов С. В. 44

Таова С. М. 198, 206, 216 Тихомиров Б. П. 68 Турусов М. Р. 88

Устимкин П. А. 188

# АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Федоркин О. О. 292	Шагалиев Р. М. 28
Циберев К. В. 44	Шаповалов Е. В. 226 Шмелёва А. К. 120 Шувалова Е. В. 44
Чевтаев С. А. 188 Челаков А. А. 44	Щуров В. В. 292
Черенкова М. В. 88 Чухманов Н. В. 88	Якутов Б. П. 162 Янилкин Ю. В. 56

# Содержание

Раздел 1. Прикладные задачи теоретической физики	
Горбатенко М. В. Решеточные дираковские матрицы и формализм стандартной модели	6
Раздел 2. Математическое моделирование физических процессов	
Шагалиев Р. М., Бутнев О. И., Глинский М. Л., Куваев А. А., Бахаев А. Н., Горев И. В., Журавлева М. В., Колесников С. С., Лысова Е. Н., Машенькин П. А., Пронин В. А., Семенов М. Е., Сидоров М. Л. Комплекс программ НИМФА. Методика решения задач нелинейной однофазной фильтрации и тепломассопереноса жидкости в пористых средах	28
Дьянов Д. Ю., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В., Наумова Е. И., Борляев В. В., Стародубов С. В., Шувалова Е. В., Медведкина М. В., Артемова Е. О., Челаков А. А., Казанцев А. В., Рябов А. А., Романов В. И., Куканов С. С. Пакет программ ЛОГОС. Модуль решения динамических задач прочности	44
Краюхин А. А., Янилкин Ю. В., Стадник А. Л., Егужова М. Ю. Метод расчета движения абсолютно твердого тела в упругопластической среде на неподвижной счетной сетке	56
Лазарев А. А., Полищук С. Н., Тихомиров Б. П. Численное решение двумерного уравнения лучистой теплопроводности методом сглаженных частиц	68
3алялов $A$ . $H$ . Alias-метод для моделирования таблично заданных распределений случайных величин	80
Смолкина Д. Н., Борисенко О. Н., Черенкова М. В., Гиниятуллина А. Г., Кузьменко М. В., Чухманов Н. В., Потехин Е. В., Попова Н. В., Турусов М. Р. Автоматический генератор неструктурированных многогранных сеток в препроцессоре пакета программ ЛОГОС	88
Лазарев В. В. Распараллеливание и оптимизация построения блочных расчетных сеток в препроцессоре пакета программ ЛОГОС	108
Воропинов А. А., Соколов С. С., Шмелёва А. К. Построение трехмерной сетки на основе диаграммы Вороного в невыпуклых областях	120
Георгиевская А. Б., Раевский В. А. Модель источника ударно-волнового пыления металлов, основанная на теории развития неустойчивости Рихтмайера – Мешкова	138
Андреюк Н. А., Голубев А. И., Пятаков Н. П., Якутов Б. П. Результаты двумерного и трехмерного моделирования ускорения электронов в плазменной кильватерной волне	162

Гусарова Е. В., Селезенев А. А., Королев В. Ю. Расчет характеристик изотермического и ударно-волнового сжатия энергетических материалов методом молекулярной динамики	172
Скляров А. В., Устимкин П. А., Селезенев А. А., Чевтаев С. А., Абрамов Н. А. Численное моделирование работы слэпперного детонатора на основе малочувствительного взрывчатого вещества	188
Раздел 3. Ядерная физика, физика ядерных реакторов	
Пикулина Г. Н., Таова С. М. Деятельность Центра ядерно-физических данных РФЯЦ-ВНИИЭФ по компиляции экспериментальных данных для международной библиотеки EXFOR. Программный комплекс EXFOR-Editor	198
Таова С. М., Генералов Л. Н., Жеребцов В. А. Оцененные значения интегральных сечений реакции $^3$ H(t, 2n) $^4$ He в низкоэнергетичной области, полученные с учетом электронного экранирования	206
Генералов Л. Н., Селянкина С. М., Таова С. М., Жеребцов В. А. Оценка сечений образования радиоактивных ядер $^{10}$ Ве при взаимодействии дейтронов с $^{9}$ Ве	216
Раздел 4. Взрывомагнитные генераторы	
Куделькин В. Б., Бабич Л. П., Гриневич Б. Е., Ивановский А. В., Краев А. И., Шаповалов Е. В. Сверхмощные дисковые электромагнитные генераторы электромагнитной энергии для исследований в области высоких плотностей энергии	226
Раздел 5. Электрофизика	
<i>Бабич Л. П.</i> Грозовые нейтроны	242
<i>Бабич Л. П.</i> Наработка радиоуглерода грозами	274
Раздел 6. Физика лазеров	
Деменкова Э. А., Зарецкий Н. А., Федоркин О. О., Щуров В. В. Исследование спектрально-временного распределения энергии генерации электроразрядного HF/DF-лазера	292
Авторский указатель	302

# ПРАВИЛА

# оформления рукописей, представляемых в сборники РФЯЦ-ВНИИЭФ

К публикации принимаются результаты оригинальных научных исследований и разработок, выполненных непосредственно сотрудниками ВНИИЭФ либо при совместном участии сотрудников ВНИИЭФ и других организаций (при условии, что вклад сотрудников ВНИИЭФ является определяющим). Статьи должны сопровождаться представлениями НТС отделений и разрешающими документами, оформленными в порядке, установленном ГК «Росатом».

**Максимальный объем статьи, как правило, не должен превышать 15 стр.** Статьи большего объема могут быть приняты к рассмотрению только по рекомендации членов редколлегии сборника. Объем заказных статей согласовывается с редколлегией.

Рукописи представляются в двух экземплярах, отпечатанных шрифтом Times New Roman высотой 12 пунктов, межстрочный интервал – двойной, левое поле 3 см, на высококачественном принтере. Статья сопровождается электронным вариантом текста на носителе (CD-R/RW, DVD-R/RW, USB Flash Drive) в формате редактора Word for Windows. Обязательные элементы статьи: классификационный индекс УДК (универсальной десятичной классификации), название статьи, фамилии и инициалы авторов, аннотация (не более 600 знаков, в индикативной форме, на русском и английском языках), ключевые слова, текст статьи, список литературы.

Количество страниц в бумажном оригинале статьи и в электронной версии должно быть одинаковым и совпадать с указанным в экспертном заключении, выданном автору!

В совместных работах с другими организациями следует указывать место работы каждого автора. На отдельных листах в обязательном порядке представить номера домашнего и служебных телефонов авторов.

Иллюстрации в электронной версии статьи должны быть представлены отдельно — в виде файлов в формате TIFF (.TIF) или JPEG (максимальное качество) (.JPG) без слоев и α-каналов. Масштаб (геометрические размеры) 1:1 с разрешением не менее 250 dpi (точек/дюйм). Название файла иллюстрации включает фамилию автора и порядковый номер рисунка в статье, например: Dzyuba\_03.tif. Подпись к иллюстрациям обязательна. Образец: «Рисунок 1. Наименование рисунка». Нумерация рисунков – сквозная.

Не допускается представлять иллюстрации, созданные с использованием внутренних инструментов Word.

**Таблицы** в тексте статьи имеют нумерационный и информационный заголовки. Нумерация таблиц – сквозная. Образец: «Таблица 3. Расчетные и экспериментальные характеристики реактора БИР-2».

**Формулы** создаются в виде целых математических выражений в редакторе Math Туре и нумеруются в круглых скобках: (2), литературные ссылки – в квадратных: [3]. Нумерация формул в статье – сквозная; нумерация типа (2a), (2б) нежелательна.

При написании статьи следует использовать общепринятые термины, единицы измерения и условные обозначения. Все употребляемые авторами обозначения должны быть определены при их первом появлении в тексте.

При наборе статьи на компьютере все латинские обозначения физических величин (A, I, d, h и т. п.) набираются курсивом, греческие обозначения, названия функций (sin, cos, exp), химических элементов ( $H_2O$ ,  $H_2C_5OH$ ) и единиц измерения (см,  $MBt/cm^2$ , с) – прямым (обычным) шрифтом.

Библиографические ссылки в списке литературы располагаются в той последовательности, в какой они упоминаются в тексте, и оформляются по следующим правилам:

Для книг: фамилия и инициалы автора(ов), название книги, место издания, издательство, год (для трудов конференций – город, страна, год). Например: Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1988. Или: Elton R. C. X-Ray Lasers. Boston: Academic Press, 1990.

Для статей в журнале, сборнике, газете: фамилия и инициалы автора(ов), название статьи, название журнала (сборника), год, том, номер (или номер выпуска), страницы. Например: Полякова А. Л., Васильев Б. М., Купенко И. Н. и др. Изменение зонной структуры полупроводников под давлением // Физика и техника полупроводников. 1976. Т. 9, № 11. С. 2356–2358. Или: Афанасьев А. М. Оптимизация распределения энерговыделения в реакторе с помощью «советов оператору» // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов. 1986. Вып. 2. С. 32–36. Или: Mezain I. H. Rolling circuit boards improves soldering // Electronics. 1977. Vol. 34, N 16. P. 193–198.

Для диссертаций и авторефератов диссертаций кроме фамилии автора и его инициалов следует указать название диссертации, степень, место защиты (город) и год, а для препринтов — название препринта, место издания, год и номер. Например: Горшкова Т. И. Термодинамические свойства и применение некоторых сплавов церия: Автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 1976.

Для патентной документации: вид патентного документа (А.с. или Пат.), его номер, название страны, выдавшей документ, индекс международной классификации изобретения, название издания, в котором опубликована формула изобретения, год и номер издания. Например: А.с. 100970 СССР, МКИ<sup>3</sup> В 25Ј 15/00. Устройство для захвата неориентированных деталей типа валов / В. С. Ваулин, В. Г. Кенайкин // Открытия. Изобретения. 1983. № 11.

Для электронных ресурсов: заглавие ресурса, сведения об издании, вид ресурса, условия доступа. Например: Исследовано в России [Электронный ресурс]. – Долгопрудный, МФТИ, 1998. – Электронный журнал. – http:// zhurnal.mipt.rssi.ru.

При необходимости в заголовке библиографической ссылки на работу четырех и более авторов могут быть указаны имена всех авторов или первых трех с добавлением слов «и др.».

Для исправления авторских и редакционных ошибок авторам предоставляется одна корректура. При этом помимо исправлений ошибок допускаются лишь незначительные изменения и дополнения. Корректура с подписями авторов должна быть возвращена в редакцию в кратчайший срок.

Рукописи, в которых не соблюдены данные правила, возвращаются авторам без рассмотрения по существу. Датой поступления в редакцию считается день нового получения рукописей.

# Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ

Научно-исследовательское издание

Выпуск 25 В двух частях

Часть 1

Редактор, корректор *Н. Ю. Зимакова* Компьютерная подготовка оригинала-макета  $\it C. H. \Phi poлова$ 

Подписано в печать 21.01.2022. Формат 60×84/8. Печать офсетная Усл. печ. л. ~35,8. Уч.-изд. л. ~25,6. Тираж 200 экз. Зак. тип. 237-2022

Отпечатано в ИПЦ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» 607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23

