ISSN 2414-0171

Вопросы Атомной Науки и Техники

Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ

СЕРИЯ

Математическое моделирование физических процессов

2021

ВЫПУСК 4

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

ФГУП "РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР — ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ

Математическое моделирование физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 4 Издается с 1978 г. **Саров — 2021**

С О Д Е Р Ж А Н И Е

C O N T E N T S

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редактор Е. Н. Старченко

Корректоры Т. А. Меркушева
Е. А. Окатьева
А. В. Федоренко

Дата выхода в свет 23.12.2021
Формат 60×84/8
Усл. печ. л. ∼ 12
Уч.-изд. л. ∼ 15
Тираж 1000 экз.
Зак. тип. 1161-2021
7 статей
Свободная цена

СМИ "Вопросы атомной науки и техники"
серия "Математическое моделирование физических процессов"
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-29789 от 04 октября 2007 г.
выдано Роскомнадзором
Учредитель: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"

Оригинал-макет подготовлен
в Математическом отделении ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
Отпечатано в ИПЦ ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23

УДК 519.6

РАЗНОСТНАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ЛУЧИСТОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ШЕСТИГРАННЫХ ЯЧЕЙКАХ СЕТКИ С ЛИНЕЙЧАТЫМИ ГРАНЯМИ

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

Представлена разностная схема решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на структурированной сетке, состоящей из произвольных шестигранных ячеек с линейчатыми гранями. Последовательно придерживаясь изначально принятого соглашения о линейчатости граней ячейки, получены формулы для объема ячейки и вектора нормали в центре ее грани. Дается определение площади грани, через которую ячейка сетки обменивается теплом с соседними ячейками, основанное на понятии векторной, или ориентированной, площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве. Описан алгоритм вычисления тепловых потоков на гранях ячеек сетки. Получена линеаризованная система разностных уравнений для итерационного решения нелинейных уравнений теплового баланса.

Ключевые слова: трехмерное уравнение лучистой теплопроводности, шестигранные ячейки сетки, линейчатые грани, нормаль к линейчатой грани, площадь грани, тепловые потоки на гранях ячеек.

Введение

Построение наиболее экономичного численного метода решения трехмерного уравнения теплопроводности связано с разностными схемами расщепления по пространственным направлениям [1]. При этом характеристики точности и экономичности расчетов зависят от выбора трех направлений расщепления на пространственной сетке и от принятой аппроксимации уравнения теплопроводности на этих направлениях.

Для разностных схем расщепления предпочтительно использовать ортогональную структурированную сетку, состоящую из прямоугольных параллелепипедов $\Omega_{k,\,i,\,l}$. Пусть первое направление расщепления составляет ряд ячеек с изменяющимся первым индексом: $\Omega_{k,\,i,\,l}$, $k = 1, 2, \ldots, N_k - 1$ (направление *вдоль строк*), второе направление расщепления — с изменяющимся вторым индексом: $\Omega_{k,\,i,\,l}$, $i = 1, 2, \ldots, N_i - 1$ (направление *вдоль столбцов*), третье направление — с изменяющимся третьим индексом: $\Omega_{k,\,i,\,l}$, $l = 1, 2, ..., N_l - 1$ (направление *вдоль листов*). При аппроксимации трехмерного уравнения теплопроводности в каждом из этих направлений записывается *одномерная* система линейных разностных уравнений с трехдиагональной матрицей, которая может быть решена методом прогонки [2]. На равномерных в каждом из направлений расщепления сетках эти уравнения аппроксимируют одномерные линейные уравнения теплопроводности со вторым порядком точности по пространству.

Такого типа численный метод для решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на прямоугольных структурированных сетках, основанный на разностной схеме расщепления, был реализован в методике ЛЭГАК [3]. Он хорошо зарекомендовал себя в решении многих, в том числе сложных, задач, представляющих практический интерес.

Однако существуют классы задач, результаты расчетов которых на прямоугольной пространственной сетке могут оказаться неудовлетворительными по точности или затратам времени на расчет. К ним относятся задачи, решение которых во многом определяется процессами лучистой (нелинейной) теплопроводности. Для адекватного описания их решения в окрестности фронта тепловой волны требуется весьма подробная пространственная сетка, ориентированная в направлении распространения волны. Попытка обеспечить нужные размеры кубических ячеек эйлеровой сетки приводит к неоправданно большому количеству ячеек во всей задаче. При этом сетка будет излишне подробной и в областях гладкого решения, где это не требуется. Количество ячеек можно существенно уменьшить без потери точности, если выбирать нужную степень подробности сетки в зависимости от локальных особенностей решения задачи, что невозможно на прямоугольных сетках. Такого типа расчеты можно проводить на подвижной лагранжево-эйлеровой сетке или эйлеровой неподвижной сетке с непрямоугольными шестигранными ячейками.

Таким образом, задача создания достаточно точного и экономичного по временным затратам численного метода решения трехмерного уравнения теплопроводности, возможности которого не ограничиваются прямоугольными сетками, является актуальной.

Работа по созданию таких численных методов решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности давно и успешно ведется многими авторами. Не претендуя на полноту списка, отметим только некоторые работы, выполненные в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

В 2004 году в методике САТУРН [4] была программно реализована разностная схема для решения трехмерного уравнения теплопроводности, являющаяся обобщением на трехмерный случай разностной схемы [5], названной авторами интерполяционно-инвариантной, с заданием значений температуры в узлах пространственной сетки.

В работе [6] изложена методика построения неявных разностных схем для решения трехмерного уравнения теплопроводности на неструктурированных сетках, основанная на дифференциально-проекционном методе.

Краткое описание разностной аппроксимации трехмерного уравнения теплопроводности на структурированных пространственных сетках методики МИМОЗА дается в работе [7].

В данной работе представлена разностная схема решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на структурированной непрямоугольной сетке, состоящей из произвольных шестигранников с линейчатыми гранями. Последовательно придерживаясь изначально принятого соглашения о линейчатости граней ячейки, получены формулы для объема ячейки и вектора нормали в центре ее грани. Дается определение площади грани, через которую ячейка обменивается теплом, основанное на понятии векторной, или ориентированной, площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве.

Получена линеаризованная система разностных уравнений для итерационного решения нелинейных уравнений теплового баланса. Описан алгоритм вычисления тепловых потоков на гранях ячеек сетки. Приведены формулы, выражающие коэффициенты при искомых значениях температуры в ячейках сетки через коэффициенты при температурах в формулах для потоков. Кратко представлен алгоритм вычисления коэффициентов в формулах для потоков.

Постановка задачи. Дискретизация

Дифференциальное уравнение, описывающее теплопроводность вещества, содержащегося в трехмерной пространственной области O, ограниченной поверхностью Γ, можно записать в виде

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\rho}\operatorname{div}\left(\chi \operatorname{grad} T\right), \tag{1}$$

где t — физическое время в задаче; ρ — плотность вещества; E — удельная внутренняя энергия единицы массы вещества; T — температура. Предполагается, что коэффициент теплопроводности $\chi = \chi\left(\rho, T\right)$ зависит от температуры, т. е. уравнение (1) является уравнением лучистой теплопроводности [8]. Функции E и T связаны взаимно обратимыми соотношениями $E = E\left(\rho, T\right)$ и

$T = T(\rho, E)$ — *уравнением состояния*, в общем случае нелинейным. Радиусы-векторы точек пространства $\vec{R} = (x, y, z)$ задаются в прямоугольной декартовой системе координат XYZ.

В начальный момент времени $t = t_0$ задано пространственное распределение температуры $T(x, y, z, t_0) = T^0(x, y, z)$.

На границе Γ рассматриваемой области O задано граничное условие одного из следующих трех типов:

1) граничная температура
$$T(\Gamma, t) = T_\Gamma(t)\,; \tag{2}$$

2) граничный поток тепла
$$\chi \frac{\partial T}{\partial N}\bigg|_\Gamma = Q_\Gamma(t)\,, \tag{3}$$
где $\dfrac{\partial T}{\partial N}\bigg|_\Gamma$ — производная температуры вдоль внешней нормали к границе области;

3) поток излучения на *свободной поверхности*
$$Q_\Gamma = \Phi(T)\,, \tag{4}$$
где $\Phi(T) = -0{,}25\sigma c T^4$, σ — постоянная Стефана—Больцмана, c — скорость света.

Уравнение лучистой теплопроводности (1) может быть записано в виде следующего закона сохранения энергии в элементарном объеме V, ограниченном поверхностью S:
$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V \rho E dv = \int\limits_S \chi\left(\operatorname{grad} T \cdot \vec{N}\right) ds = \int\limits_S \chi \frac{\partial T}{\partial N} ds, \tag{5}$$
где $\dfrac{\partial T}{\partial N}$ — производная температуры по направлению внешней нормали к поверхности S.

Аппроксимация уравнения теплопроводности строится на структурированной сетке с шестигранными ячейками, не обязательно прямоугольными. Предполагается, что совокупность внешних граней приграничных ячеек сетки достаточно хорошо аппроксимирует границу Γ области O, а объединение ячеек заполняет область O без зазоров и перекрытий.

На рис. 1 показана ячейка сетки $\Omega_{k,i,l}$, $k = 1, 2, \ldots, N_k - 1$, $i = 1, 2, \ldots, N_i - 1$, $l = 1, 2, \ldots, N_l - 1$, с глобальной нумерацией ее вершин тройными нижними индексами, $\vec{R}_{k,i,l} = (x_{k,i,l}, y_{k,i,l}, z_{k,i,l})$, $k = 1, 2, \ldots, N_k$, $i = 1, 2, \ldots, N_i$, $l = 1, 2, \ldots, N_l$, и с их локальной нумерацией относительно данной ячейки $\Omega_{k,i,l}$: $\vec{R}_1, \ldots, \vec{R}_8$.

Рис. 1. Ячейка сетки $\Omega_{k,i,l}$ с локальной нумерацией вершин и граней

При построении разностной схемы предполагается, что значения энергии, плотности и температуры определены в ячейках сетки. Они обозначаются теми же нижними индексами, что и сама ячейка сетки, в которой эти величины определены: $E_{k,\,i,\,l}$, $\rho_{k,\,i,\,l}$, $T_{k,\,i,\,l}$.

Верхний индекс n $(n+1)$ при значениях величин, зависящих от времени, будет указывать момент времени $t = t^n$ $\left(t = t^{n+1}\right)$, на который определена соответствующая величина, например, $E^n = E\left(t^n\right)$, $T^n = T\left(t^n\right)$; n $(n+1)$ — номер шага по времени. Через $\tau^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$ обозначается значение шага по времени.

Локальные номера граней ячейки $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1,\,6}$, на рис. 1 заключены в прямоугольники. Каждая грань является линейчатой поверхностью, натянутой на соответствующие четыре вершины [9, 10]. Параметрическое уравнение, например, грани Г1 ($\vec{R}_1\,\vec{R}_2\,\vec{R}_3\,\vec{R}_4$ на рис. 1) можно записать в виде

$$\vec{R} = 0{,}25\left(\vec{R}_a + \vec{R}_b\,\alpha + \vec{R}_c\,\beta + \vec{R}_d\,\alpha\beta\right), \quad -1 \le \alpha \le 1, \quad -1 \le \beta \le 1, \tag{6}$$

где $\vec{R}_a = \vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4$; $\vec{R}_b = -\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 - \vec{R}_4$; $\vec{R}_c = -\vec{R}_1 - \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4$; $\vec{R}_d = \vec{R}_1 - \vec{R}_2 + \vec{R}_3 - \vec{R}_4$; направления возрастания параметров α и β показаны на рис. 2. Аналогичные уравнения имеют место для остальных граней. Заметим, что при значениях $\alpha = 0$, $\beta = 0$ из (6) получаем координаты центральной точки грани Г1 (см. рис. 2):

$$\vec{R}_0 = 0{,}25\left(\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4\right). \tag{7}$$

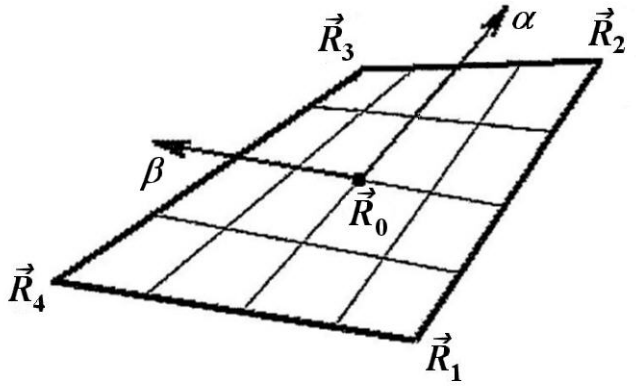

Рис. 2. Грань Г1 ячейки сетки $\Omega_{k,\,i,\,l}$

Очевидно, что все ребра шестигранной ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$, поверхности граней которой задаются уравнениями вида (6), являются прямолинейными.

Для дальнейшего понадобится следующая развернутая запись векторного уравнения (6):

$$\begin{aligned} x = 0{,}25\,[&x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + (-x_1 + x_2 + x_3 - x_4)\,\alpha + \\ &+ (-x_1 - x_2 + x_3 + x_4)\,\beta + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4)\,\alpha\beta]\,; \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} y = 0{,}25\,[&y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + (-y_1 + y_2 + y_3 - y_4)\,\alpha + \\ &+ (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4)\,\beta + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4)\,\alpha\beta]\,; \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} z = 0{,}25\,[&z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + (-z_1 + z_2 + z_3 - z_4)\,\alpha + \\ &+ (-z_1 - z_2 + z_3 + z_4)\,\beta + (z_1 - z_2 + z_3 - z_4)\,\alpha\beta]\,. \end{aligned} \tag{10}$$

При задании поверхности параметрическими уравнениями (8)—(10) вида $x = x\,(\alpha,\beta)$, $y = y\,(\alpha,\beta)$, $z = z\,(\alpha,\beta)$ предполагается [11], что не обращаются в нуль одновременно три следующих функциональных определителя:

$$\frac{D\,(y,z)}{D\,(\alpha,\beta)} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial y}{\partial \alpha} & \dfrac{\partial z}{\partial \alpha} \\ \dfrac{\partial y}{\partial \beta} & \dfrac{\partial z}{\partial \beta} \end{vmatrix} = \frac{\partial y}{\partial \alpha}\frac{\partial z}{\partial \beta} - \frac{\partial y}{\partial \beta}\frac{\partial z}{\partial \alpha}; \tag{11}$$

$$\frac{D\,(z,x)}{D\,(\alpha,\beta)} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial z}{\partial \alpha} & \dfrac{\partial x}{\partial \alpha} \\ \dfrac{\partial z}{\partial \beta} & \dfrac{\partial x}{\partial \beta} \end{vmatrix} = \frac{\partial z}{\partial \alpha}\frac{\partial x}{\partial \beta} - \frac{\partial z}{\partial \beta}\frac{\partial x}{\partial \alpha}; \tag{12}$$

$$\frac{D(x,y)}{D(\alpha,\beta)} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial \alpha} & \dfrac{\partial y}{\partial \alpha} \\ \dfrac{\partial x}{\partial \beta} & \dfrac{\partial y}{\partial \beta} \end{vmatrix} = \frac{\partial x}{\partial \alpha}\frac{\partial y}{\partial \beta} - \frac{\partial x}{\partial \beta}\frac{\partial y}{\partial \alpha}. \tag{13}$$

Запишем явные выражения для определителей (11)—(13). Из уравнений (8)—(10) имеем

$$\frac{\partial x}{\partial \alpha} = \frac{1}{4}\left[-x_1 + x_2 + x_3 - x_4 + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4)\,\beta\right]; \tag{14}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \alpha} = \frac{1}{4}\left[-y_1 + y_2 + y_3 - y_4 + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4)\,\beta\right]; \tag{15}$$

$$\frac{\partial z}{\partial \alpha} = \frac{1}{4}\left[-z_1 + z_2 + z_3 - z_4 + (z_1 - z_2 + z_3 - z_4)\,\beta\right]; \tag{16}$$

$$\frac{\partial x}{\partial \beta} = \frac{1}{4}\left[-x_1 - x_2 + x_3 + x_4 + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4)\,\alpha\right]; \tag{17}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \beta} = \frac{1}{4}\left[-y_1 - y_2 + y_3 + y_4 + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4)\,\alpha\right]; \tag{18}$$

$$\frac{\partial z}{\partial \beta} = \frac{1}{4}\left[-z_1 - z_2 + z_3 + z_4 + (z_1 - z_2 + z_3 - z_4)\,\alpha\right]. \tag{19}$$

После несложных, хотя и громоздких, преобразований получим

$$\frac{D(y,z)}{D(\alpha,\beta)} = \frac{1}{4}\left[S^{YZ}_{1234} + \left(S^{YZ}_{123} - S^{YZ}_{124}\right)\alpha + \left(S^{YZ}_{134} - S^{YZ}_{124}\right)\beta\right]; \tag{20}$$

$$\frac{D(z,x)}{D(\alpha,\beta)} = \frac{1}{4}\left[S^{ZX}_{1234} + \left(S^{ZX}_{123} - S^{ZX}_{124}\right)\alpha + \left(S^{ZX}_{134} - S^{ZX}_{124}\right)\beta\right]; \tag{21}$$

$$\frac{D(x,y)}{D(\alpha,\beta)} = \frac{1}{4}\left[S^{XY}_{1234} + \left(S^{XY}_{123} - S^{XY}_{124}\right)\alpha + \left(S^{XY}_{134} - S^{XY}_{124}\right)\beta\right]. \tag{22}$$

Здесь S обозначает площадь; верхние индексы YZ, ZX, XY означают проекции пространственной фигуры на координатные плоскости OYZ, OZX, OXY соответственно; нижние индексы указывают локальные номера и порядок следования вершин пространственной фигуры. Так, S_{1234} обозначает площадь пространственного четырехугольника, каковым является грань Г1 ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$ (см. рис. 2); S_{123}, S_{124}, S_{134} — площади треугольников, построенных из вершины $\vec{R}_1$ грани Г1.

Введем обозначения

$$\vec{R}_\alpha = \left(\frac{\partial x}{\partial \alpha}, \frac{\partial y}{\partial \alpha}, \frac{\partial z}{\partial \alpha}\right); \quad \vec{R}_\beta = \left(\frac{\partial x}{\partial \beta}, \frac{\partial y}{\partial \beta}, \frac{\partial z}{\partial \beta}\right). \tag{23}$$

Компоненты векторов (23) определяются формулами (14)—(19). Векторы $\vec{R}_\alpha$, $\vec{R}_\beta$ определяют касательную плоскость в любой точке $\vec{R} = \vec{R}(\alpha,\beta)$ грани Г1 ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$. Их векторное произведение $\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta$ представляет собой вектор, параллельный нормали, а вектор $\vec{N} = \dfrac{\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta}{\left|\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta\right|}$ есть единичный вектор внешней нормали в точке $\vec{R}(\alpha,\beta)$ грани Г1.

Непосредственной проверкой можно убедиться, что векторное произведение $\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta$ имеет своими компонентами три определителя (11)—(13):

$$\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta = \left(\frac{D(y,z)}{D(\alpha,\beta)}, \frac{D(z,x)}{D(\alpha,\beta)}, \frac{D(x,y)}{D(\alpha,\beta)}\right), \tag{24}$$

которые для грани Г1 ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$ (см. рис. 1) вычисляются по формулам (20)—(22). Соответственно единичный вектор нормали $\vec{N}$ имеет следующие составляющие по координатным осям:

$$N_x = \frac{1}{L}\frac{D(y,z)}{D(\alpha,\beta)}; \quad N_y = \frac{1}{L}\frac{D(z,x)}{D(\alpha,\beta)}; \quad N_z = \frac{1}{L}\frac{D(x,y)}{D(\alpha,\beta)}, \tag{25}$$

где

$$L = \sqrt{\left(\frac{D\,(y,z)}{D\,(\alpha,\beta)}\right)^2 + \left(\frac{D\,(z,x)}{D\,(\alpha,\beta)}\right)^2 + \left(\frac{D\,(x,y)}{D\,(\alpha,\beta)}\right)^2}.$$

Очевидно, что если грань ячейки вырождается в отрезок или точку, то все три определителя (20)—(22) на этой грани обращаются в нуль. Ни в одной точке такой "грани" невозможно построить нормаль (25) к ее поверхности, да и поверхности-то нет. Забегая вперед, отметим, что если в задаче допускать наличие таких ячеек с вырожденными гранями, то эти грани нужно обрабатывать особым образом, например, не прибегая к вычислениям, сразу же поток тепла на этой грани положить равным нулю.

Разностный аналог закона сохранения энергии

Разностная схема строится на основе разностного аналога закона сохранения энергии (5). В качестве элементарного объема интегрирования используется пространственная ячейка сетки. Очередную ячейку $\Omega_{k,\,i,\,l}$, для которой записан закон сохранения энергии, будем для краткости называть ячейкой консервативности. Разностное уравнение сохранения энергии в ячейке консервативности можно записать в следующем виде:

$$M_{k,\,i,\,l}\,\frac{E^{n+1}_{k,\,i,\,l} - E^{n}_{k,\,i,\,l}}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\gamma=1}^{6} S_\gamma Q^{n+1}_\gamma. \tag{26}$$

Здесь $M_{k,\,i,\,l} = \rho_{k,\,i,\,l} V_{k,\,i,\,l}$ — не зависящая от времени масса шестигранной ячейки консервативности объемом $V_{k,\,i,\,l}$. Суммирование в правой части уравнения (26) ведется по всем граням $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1,6}$, ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$. Локальная нумерация граней показана на рис. 1.

Объем шестигранной ячейки сетки с линейчатыми гранями может быть вычислен по следующей формуле:

$$V_{k,\,i,\,l} = \frac{1}{3}\sum_{\gamma=1}^{6}\left(x_0^{(\gamma)} S_\gamma^{YZ} + y_0^{(\gamma)} S_\gamma^{ZX} + z_0^{(\gamma)} S_\gamma^{XY}\right), \tag{27}$$

где $\vec{R}_0^{(\gamma)} = \left(x_0^{(\gamma)},\, y_0^{(\gamma)},\, z_0^{(\gamma)}\right) = 0{,}25\left(\vec{R}_1^{(\gamma)} + \vec{R}_2^{(\gamma)} + \vec{R}_3^{(\gamma)} + \vec{R}_4^{(\gamma)}\right)$ — центральные точки граней $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1,6}$, ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$ (см. рис. 1); S_γ^{YZ}, S_γ^{ZX}, S_γ^{XY} — площади проекций граней $\Gamma\gamma$ на координатные плоскости OYZ, OZX, OXY соответственно, которые вычисляются по формулам

$$S_\gamma^{YZ} = 0{,}5\left[\left(y_2^{(\gamma)} - y_4^{(\gamma)}\right)\left(z_3^{(\gamma)} - z_1^{(\gamma)}\right) - \left(y_3^{(\gamma)} - y_1^{(\gamma)}\right)\left(z_2^{(\gamma)} - z_4^{(\gamma)}\right)\right]; \tag{28}$$

$$S_\gamma^{ZX} = 0{,}5\left[\left(z_2^{(\gamma)} - z_4^{(\gamma)}\right)\left(x_3^{(\gamma)} - x_1^{(\gamma)}\right) - \left(z_3^{(\gamma)} - z_1^{(\gamma)}\right)\left(x_2^{(\gamma)} - x_4^{(\gamma)}\right)\right]; \tag{29}$$

$$S_\gamma^{XY} = 0{,}5\left[\left(x_2^{(\gamma)} - x_4^{(\gamma)}\right)\left(y_3^{(\gamma)} - y_1^{(\gamma)}\right) - \left(x_3^{(\gamma)} - x_1^{(\gamma)}\right)\left(y_2^{(\gamma)} - y_4^{(\gamma)}\right)\right]. \tag{30}$$

При их вычислении на каждой грани используется своя локальная нумерация вершин $\vec{R}_m^{(\gamma)}$, $m = \overline{1,4}$, направленная против часовой стрелки для наблюдателя, расположенного на внешней стороне грани.

Формула (27) точно выражает объем шестигранника с линейчатыми гранями через координаты его вершин и привлекает своей простотой. Подробный вывод формулы содержится в работах [7, 8].

Величины

$$Q^{n+1}_\gamma = \chi^{n+1}_{0\gamma}\left(\frac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}\right)^{n+1} \tag{31}$$

в разностном уравнении теплового баланса (26) аппроксимируют потоки тепла через единицу площади за единицу времени на гранях ячейки консервативности. Верхний индекс $n{+}1$ здесь указывает на то, что все значения температуры T при вычислении потоков берутся с верхнего слоя по времени $t = t^{n+1}$, т. е. схема является неявной.

$\chi_{0\gamma}$ в формуле (31) обозначают коэффициенты теплопроводности, определенные на гранях $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1,6}$, ячейки $\Omega_{k,i,l}$ (см. рис. 1). Значение коэффициента теплопроводности не определяется непосредственно на гранях ячейки, но получается усреднением значений в данной ячейке $\Omega 0 \equiv \equiv \Omega_{k,i,l}$ и в соседних ячейках сетки, имеющих общую грань с ячейкой $\Omega_{k,i,l}$. Известно несколько наиболее распространенных способов такого усреднения коэффициентов теплопроводности, которые здесь не рассматриваются. Исследованию их влияния на точность расчетов посвящена, например, работа [12], где приводятся ссылки на другие работы.

Запись $\dfrac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}$ в формуле (31) обозначает производную температуры по направлению нормали, проведенной из центральной точки грани $\Gamma\gamma$ с номером $\gamma = \overline{1,6}$. Для вычисления этой производной нужно определить единичный вектор внешней нормали в центральной точке грани $\Gamma\gamma$. Компоненты единичного вектора нормали в любой точке грани $\Gamma\gamma$ определяются формулами (25). Для нормали в центральной точке (см. рис. 3) все производные в этих формулах нужно взять при $\alpha = 0$, $\beta = 0$. Тогда с учетом (20)—(22) для любой из граней $\Gamma\gamma$ ячейки $\Omega_{k,i,l}$ получим

$$N_x^{(\gamma)} = \frac{S_\gamma^{YZ}}{L_\gamma}; \quad N_y^{(\gamma)} = \frac{S_\gamma^{ZX}}{L_\gamma}; \quad N_z^{(\gamma)} = \frac{S_\gamma^{XY}}{L_\gamma}, \tag{32}$$

где $L_\gamma = \sqrt{\left(S_\gamma^{YZ}\right)^2 + \left(S_\gamma^{ZX}\right)^2 + \left(S_\gamma^{XY}\right)^2}$; S_γ^{YZ}, S_γ^{ZX}, S_γ^{XY} — площади проекций граней $\Gamma\gamma$, вычисляемые по формулам (28)—(30).

S_γ, $\gamma = \overline{1,6}$, в правой части уравнения (26) обозначают площади граней ячейки $\Omega_{k,i,l}$, через которые происходит обмен теплом между ячейкой консервативности и соседними ячейками сетки, обусловленный интегральными тепловыми потоками

$$S_\gamma Q_\gamma^{n+1} = \chi_{0\gamma}^{n+1} S_\gamma \left(\frac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}\right)^{n+1}. \tag{33}$$

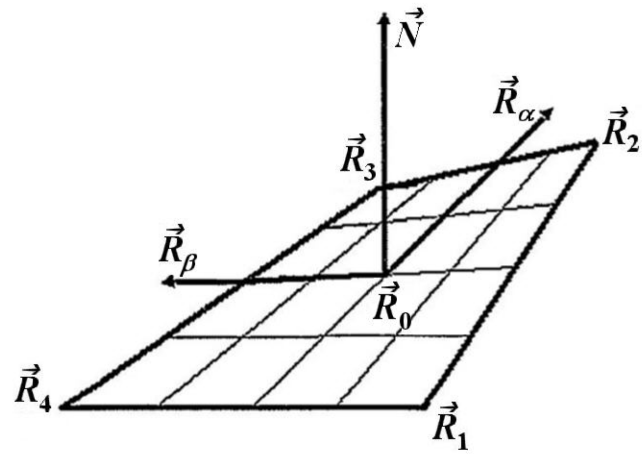

Рис. 3. Вектор нормали в центральной точке грани

Для пространственной поверхности, заданной параметрическим векторным уравнением (6) или, что то же самое, уравнениями (8)—(10), определяются скалярный и векторный элементы площади [9]:

$$dS = \sqrt{s(\alpha,\beta)}\,d\alpha d\beta; \tag{34}$$

$$d\vec{S} = \left(\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta\right) d\alpha d\beta = \vec{N} dS, \tag{35}$$

где

$$s(\alpha,\beta) = \left|\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta\right|^2 = \left(\frac{D(y,z)}{D(\alpha,\beta)}\right)^2 + \left(\frac{D(z,x)}{D(\alpha,\beta)}\right)^2 + \left(\frac{D(x,y)}{D(\alpha,\beta)}\right)^2. \tag{36}$$

Для определения векторной (или ориентированной) площади $\vec{S}^{(\gamma)}$ грани $\Gamma\gamma$ ячейки консервативности $\Omega_{k,i,l}$ нужно вычислить интеграл от векторного элемента площади (35):

$$\vec{S}^{(\gamma)} = \iint\limits_{\Gamma\gamma} \left(\vec{R}_\alpha \times \vec{R}_\beta\right) d\alpha d\beta. \tag{37}$$

Сначала рассмотрим грань $\Gamma 1$ ячейки $\Omega_{k,i,l}$ (см. рис. 1). Учитывая компоненты вектора $\vec{R}_\alpha \times \times \vec{R}_\beta$ (24) и их выражения на грани $\Gamma 1$ (20)—(22), из (37) вычислим координаты вектора ориентированной площади $\vec{S}^{(1)} = \left(S_x^{(1)}, S_y^{(1)}, S_z^{(1)}\right)$:

$$S_x^{(1)} = \iint\limits_{\Gamma 1} \frac{D(y,z)}{D(\alpha,\beta)} d\alpha d\beta = \frac{1}{4} \iint\limits_{\Gamma 1} \left[S_{1234}^{YZ} + \left(S_{123}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\alpha + \left(S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\beta\right] d\alpha d\beta =$$

$$= \frac{1}{4} \int\limits_{-1}^{1} d\beta \int\limits_{-1}^{1} \left[S_{1234}^{YZ} + \left(S_{123}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\alpha + \left(S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\beta\right] d\alpha =$$

$$= \frac{1}{4} \int\limits_{-1}^{1} d\beta \left[S_{1234}^{YZ}\alpha + \left(S_{123}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\frac{\alpha^2}{2} + \left(S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\beta\alpha\right]\Bigg|_{-1}^{1} =$$

$$= \frac{1}{2} \int\limits_{-1}^{1} \left[S_{1234}^{YZ} + \left(S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\beta\right] d\beta = \frac{1}{2} \left[S_{1234}^{YZ}\beta + \left(S_{134}^{YZ} - S_{124}^{YZ}\right)\frac{\beta^2}{2}\right]\Bigg|_{-1}^{1} = S_{1234}^{YZ}. \qquad (38)$$

Аналогично вычисляются оставшиеся две компоненты вектора $\vec{S}^{(1)}$:

$$S_y^{(1)} = \iint\limits_{\Gamma 1} \frac{D(z,x)}{D(\alpha,\beta)} d\alpha\, d\beta = S_{1234}^{ZX}; \quad S_z^{(1)} = \iint\limits_{\Gamma 1} \frac{D(x,y)}{D(\alpha,\beta)} d\alpha\, d\beta = S_{1234}^{XY}. \qquad (39)$$

Заметим, что если на каждой грани $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1,6}$, ячейки консервативности $\Omega_{k,\,i,\,l}$ (см. рис. 1) использовать локальную нумерацию вершин грани $\vec{R}_m^{(\gamma)}$, $m = \overline{1,4}$, по направлению против часовой стрелки для наблюдателя, расположенного на внешней стороне грани, то формулы (38), (39) справедливы для любой грани $\Gamma\gamma$, а не только для грани $\Gamma 1$.

Таким образом, векторная площадь $\vec{S}^{(\gamma)} = \left(S_x^{(\gamma)},\, S_y^{(\gamma)},\, S_z^{(\gamma)}\right)$ любой из граней $\Gamma\gamma$ имеет следующие составляющие вдоль осей координат:

$$S_x^{(\gamma)} = S_{1234}^{YZ} \equiv S_\gamma^{YZ}; \quad S_y^{(\gamma)} = S_{1234}^{ZX} \equiv S_\gamma^{ZX}; \quad S_z^{(\gamma)} = S_{1234}^{XY} \equiv S_\gamma^{XY}. \qquad (40)$$

При вычислении интегрального потока тепла (33) предполагается, что направление потока на всей грани ячейки сетки определяется нормалью в центре грани и что оно везде одно и то же. Поэтому в качестве скалярной площади грани S_γ в формуле (33), через которую происходит обмен теплом между ячейкой консервативности $\Omega_{k,\,i,\,l}$ и соседними ячейками сетки, берется проекция векторной площади (40) на вектор нормали (32) в центральной точке грани:

$$S_\gamma = N_x^{(\gamma)} S_x^{(\gamma)} + N_y^{(\gamma)} S_y^{(\gamma)} + N_z^{(\gamma)} S_z^{(\gamma)}.$$

Учитывая компоненты вектора нормали (32), получим

$$S_\gamma = \sqrt{\left(S_\gamma^{YZ}\right)^2 + \left(S_\gamma^{ZX}\right)^2 + \left(S_\gamma^{XY}\right)^2}. \qquad (41)$$

Вычислить точное значение скалярной площади грани путем интегрирования элемента площади (34) весьма затруднительно, так как интеграл

$$\widetilde{S}_\gamma = \iint\limits_{\Gamma\gamma} \sqrt{s(\alpha,\beta)}\, d\alpha d\beta \qquad (42)$$

не выражается в элементарных функциях. Пользуясь теоремой о среднем, вычислим приближенное значение $\widetilde{S}_\gamma$ интеграла (42). Среднее по области интегрирования $-1 \le \alpha \le 1$, $-1 \le \beta \le 1$ значение подынтегральной функции получается при значениях $\alpha = 0$, $\beta = 0$. В соответствии с (36) с учетом (20)—(22) получим

$$\sqrt{s(\alpha = 0, \beta = 0)} = \frac{1}{4}\sqrt{\left(S_\gamma^{YZ}\right)^2 + \left(S_\gamma^{ZX}\right)^2 + \left(S_\gamma^{XY}\right)^2}.$$

Интеграл $\iint\limits_{\Gamma\gamma} d\alpha\, d\beta$ по грани интегрирования равен $\iint\limits_{\Gamma\gamma} d\alpha\, d\beta = \int\limits_{-1}^{1} d\beta \int\limits_{-1}^{1} d\alpha = 4$. То есть интеграл (42) приблизительно равен

$$\widetilde{S}_\gamma = \sqrt{\left(S_\gamma^{YZ}\right)^2 + \left(S_\gamma^{ZX}\right)^2 + \left(S_\gamma^{XY}\right)^2}. \tag{43}$$

Таким образом, скалярная площадь грани (41), основанная на понятии векторной (или ориентированной) площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве, совпадает со скалярной площадью (43), полученной приближенным интегрированием элемента скалярной площади линейчатой поверхности, что подтверждает согласованность выбора скалярной площади $S_\gamma = \widetilde{S}_\gamma$ грани ячейки в формуле (33) для интегрального потока.

Представленная разностная схема строится на трехмерной непрямоугольной структурированной шестигранной сетке. Для аппроксимации производных температуры $\dfrac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}$ вдоль внешней нормали к граням ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$ на такой сетке приходится использовать сеточный шаблон, состоящий из 27 ячеек. На рис. 4—6 схематично показаны три слоя ячеек шаблона, по 9 ячеек в каждом слое, разбитых в направлениях по строкам, столбцам и листам.

Для сокращения записи при описании схемы вводится локальная нумерация ячеек сетки и значений сеточных функций в этих ячейках.

В кружках на рис. 4—6 приведена локальная нумерация $\Omega1$—$\Omega26$ соседних ячеек сетки относительно рассматриваемой ячейки консервативности $\Omega_{k,\,i,\,l}$. Самой ячейке $\Omega_{k,\,i,\,l}$ присваивается номер 0, т. е. $\Omega0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$. Локальные номера шести ячеек, соседних с ячейкой $\Omega0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$ по ее граням, определяются локальными номерами (см. рис. 1) этих граней. То есть

$$\begin{aligned} &\Omega1 \equiv \Omega_{k-1,\,i,\,l}; \quad \Omega2 \equiv \Omega_{k+1,\,i,\,l}; \quad \Omega3 \equiv \Omega_{k,\,i-1,\,l};\\ &\Omega4 \equiv \Omega_{k,\,i+1,\,l}; \quad \Omega5 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l-1}; \quad \Omega6 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l+1}. \end{aligned} \tag{44}$$

Далее, номера $\Omega7$—$\Omega10$ используются для ячеек, соседних с ячейкой $\Omega1 \equiv \Omega_{k-1,\,i,\,l}$ (см. рис. 4) по ее граням с номерами Г3, Г4, Г5, Г6 (см. рис. 1), так что

$$\Omega7 \equiv \Omega_{k-1,\,i-1,\,l}; \quad \Omega8 \equiv \Omega_{k-1,\,i+1,\,l}; \quad \Omega9 \equiv \Omega_{k-1,\,i,\,l-1}; \quad \Omega10 \equiv \Omega_{k-1,\,i,\,l+1}. \tag{45}$$

Номера $\Omega11$—$\Omega14$ присваиваются ячейкам, соседним с ячейкой $\Omega2 \equiv \Omega_{k+1,\,i,\,l}$ (см. рис. 4) также по ее граням с номерами Г3, Г4, Г5, Г6 (см. рис. 1):

$$\Omega11 \equiv \Omega_{k+1,\,i-1,\,l}; \quad \Omega12 \equiv \Omega_{k+1,\,i+1,\,l}; \quad \Omega13 \equiv \Omega_{k+1,\,i,\,l-1}; \quad \Omega14 \equiv \Omega_{k+1,\,i,\,l+1}. \tag{46}$$

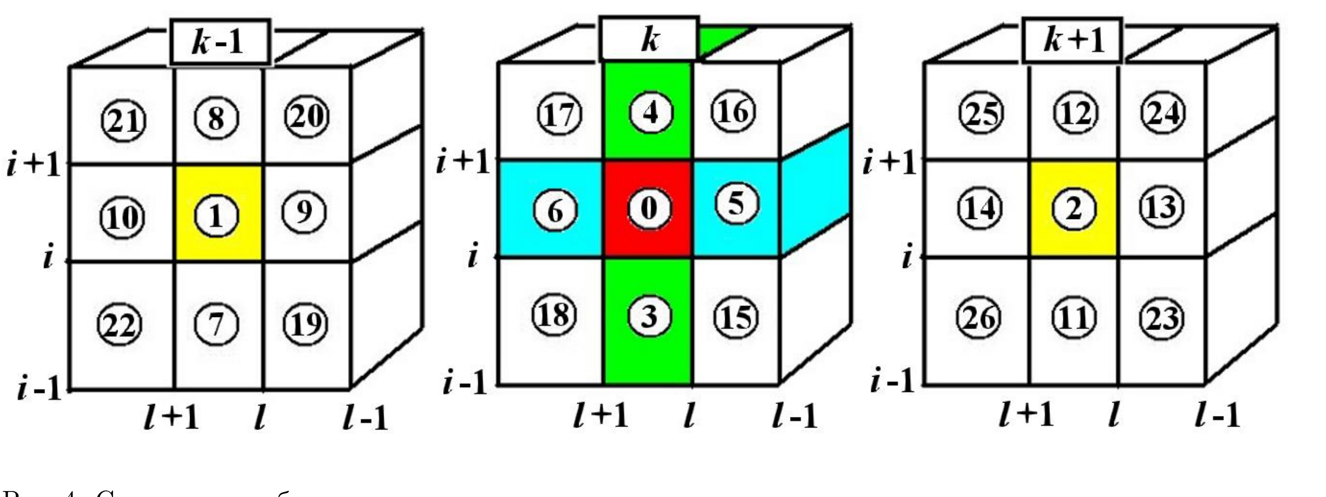

Рис. 4. Слои ячеек шаблона по строкам

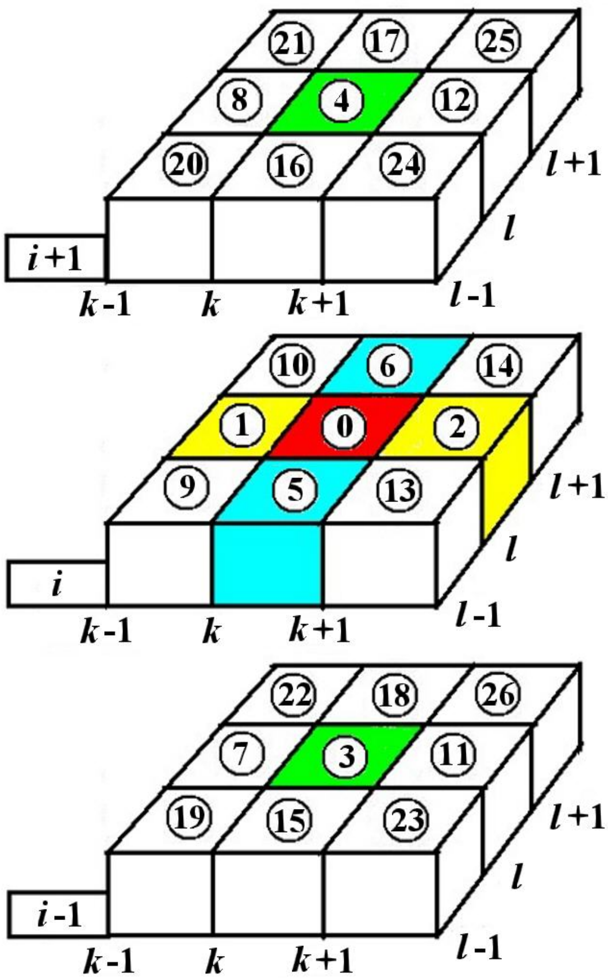

Рис. 5. Слои ячеек шаблона по столбцам

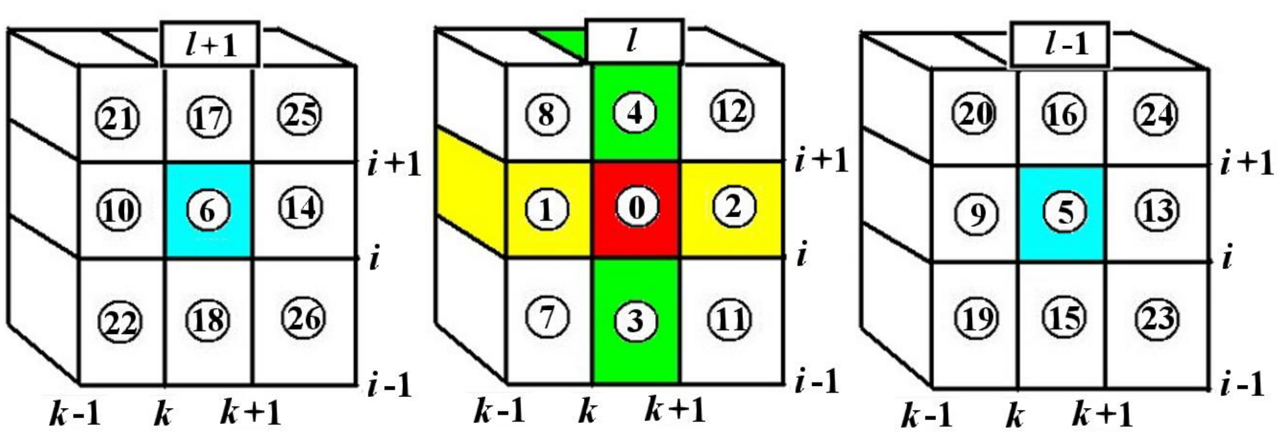

Рис. 6. Слои ячеек шаблона по листам

Ячейки с номерами $\Omega 15$—$\Omega 18$ расположены на слое ячеек, отвечающих первому индексу k (см. рис. 4). Все они имеют единственное общее ребро с ячейкой $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$, т. е. в некотором смысле расположены по диагоналям к ячейке $\Omega_{k,\,i,\,l}$. Нумерация начинается с ребра $\vec{R}_1\vec{R}_8$ ячейки $\Omega_{k,\,i,\,l}$ (см. рис. 1) и далее следует обходу ребер в порядке $\vec{R}_2\vec{R}_7$, $\vec{R}_3\vec{R}_6$, $\vec{R}_4\vec{R}_5$. Таким образом:

$$\Omega 15 \equiv \Omega_{k,\,i-1,\,l-1}; \quad \Omega 16 \equiv \Omega_{k,\,i+1,\,l-1}; \quad \Omega 17 \equiv \Omega_{k,\,i+1,\,l+1}; \quad \Omega 18 \equiv \Omega_{k,\,i-1,\,l+1}. \tag{47}$$

Аналогично нумеруются четыре ячейки, *диагональные* по отношению к $\Omega_{k-1,\,i,\,l}$, которые расположены на слое, отвечающем первому индексу $k-1$ (см. рис. 4):

$$\Omega 19 \equiv \Omega_{k-1,\,i-1,\,l-1}; \quad \Omega 20 \equiv \Omega_{k-1,\,i+1,\,l-1}; \quad \Omega 21 \equiv \Omega_{k-1,\,i+1,\,l+1}; \quad \Omega 22 \equiv \Omega_{k-1,\,i-1,\,l+1}. \tag{48}$$

Наконец, для ячеек, расположенных по диагоналям к ячейке $\Omega_{k+1,\,i,\,l}$ (см. рис. 4), вводится следующая нумерация:

$$\Omega 23 \equiv \Omega_{k+1,\,i-1,\,l-1}; \quad \Omega 24 \equiv \Omega_{k+1,\,i+1,\,l-1}; \quad \Omega 25 \equiv \Omega_{k+1,\,i+1,\,l+1}; \quad \Omega 26 \equiv \Omega_{k+1,\,i-1,\,l+1}. \tag{49}$$

Разностная производная температуры по нормали

Для вычисления разностной производной температуры по направлению нормали $\dfrac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}$, фигурирующей в определении теплового потока (33) на грани $\Gamma\gamma$, $\gamma = \overline{1,6}$, ячейки $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$, здесь используется обобщение на трехмерный случай алгоритма, который был реализован в программе для решения двумерного уравнения теплопроводности еще в методике СИГМА [13]. Этот подход позволяет избежать, например, неприятного *шахматного эффекта* [14] в численном решении задачи на квадратных и кубических сетках, когда значения температуры в соседних ячейках, расположенных в шахматном порядке, очень сильно колеблются от точки к точке даже в задачах с гладкими аналитическими решениями. Проявление такого эффекта возможно, когда для аппроксимации потоков на гранях ячеек сетки используется разностный градиент температуры из (5), аналогичный градиенту давления в некоторых разностных схемах газовой динамики.

Рассмотрим некоторую ячейку консервативности $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$, на грани которой, например $\Gamma 1$ с вершинами R_1, R_2, R_3, R_4, нужно найти разностную производную $\dfrac{\partial T}{\partial N^{(1)}}$ по нормали $\vec{N}^{(1)}$ (32), проведенной из центральной точки $G1 \equiv R_{G1} \equiv R_0$ (7) этой грани в сторону соседней ячейки $\Omega 1 \equiv \Omega_{k-1,\,i,\,l}$ (см. рис. 1), схематично представленной на рис. 7. Для удобства записи здесь и далее $R_m \equiv \vec{R}_m$, $m = 0, 1, \ldots, 4$.

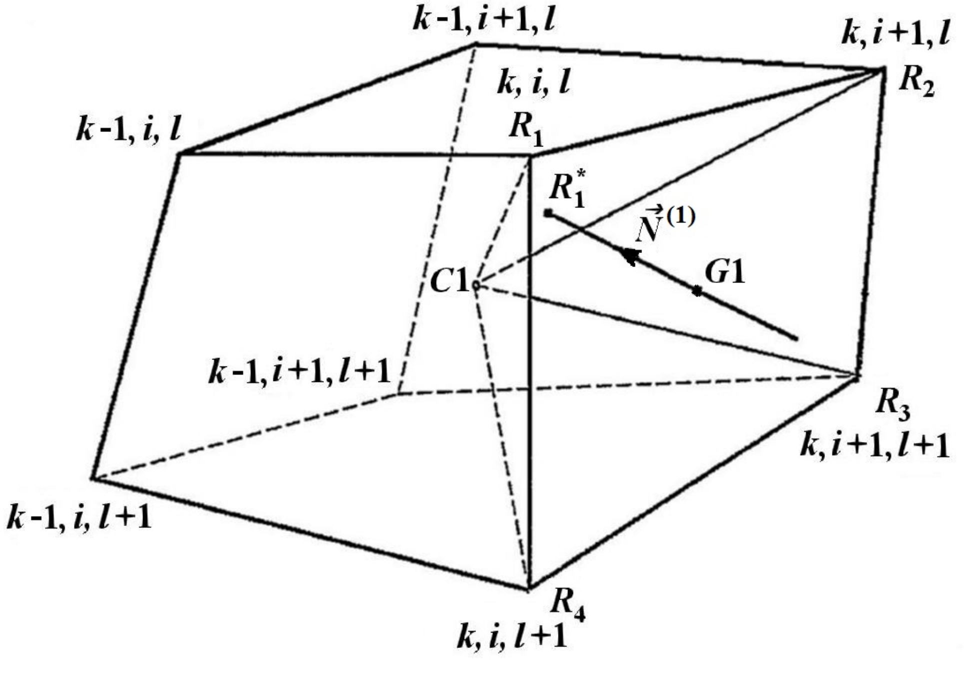

Рис. 7. К вычислению производной по нормали к грани ячейки

Для начала центральная точка $C1 \equiv R_{C1}$ ячейки сетки $\Omega 1 \equiv \Omega_{k-1,\,i,\,l}$, соседней к ячейке консервативности, соединяется отрезками прямых с вершинами рассматриваемой грани $\Gamma 1$. При этом образуется четыре пространственных треугольника: $R_{C1}R_1R_2$, $R_{C1}R_2R_3$, $R_{C1}R_3R_4$, $R_{C1}R_4R_1$ (см. рис. 7), которые для краткости будем называть *интерполяционными треугольниками.* В качестве центральной выбирается точка с координатами, равными средним арифметическим координат вершин ячейки. Так, для ячейки $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$, изображенной на рис. 1:

$$\vec{R}_{C0} = 0{,}125\left(\vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4 + \vec{R}_5 + \vec{R}_6 + \vec{R}_7 + \vec{R}_8\right). \tag{50}$$

Затем ищется точка пересечения R^* прямой, проходящей в направлении нормали через точку $G1$, с одним из интерполяционных треугольников — *точка интерполирования температуры.* В знак того, что эта точка лежит в ячейке $\Omega 1$, добавим к обозначению точки пересечения соответствующий нижний индекс, так что $R^* = R_1^*$.

Значение температуры T_{C1} в ячейке $\Omega 1$ будем считать определенным в центральной точке R_{C1} (50) (см. рис. 7). Кроме того, определены температуры в вершинах грани $\Gamma 1$: T_1, T_2, T_3, T_4. Они определяются как средние арифметические значений температуры в тех восьми ячейках, для которых данная вершина является общей.

Значение температуры T_1^* в точке интерполирования R_1^* определяется с помощью барицентрических координат [15] по значениям температуры в вершинах треугольника, в котором расположена точка R_1^* (см. далее). На рис. 7 это треугольник $R_{C1}R_1R_2$.

Аналогичное построение выполняется в самой ячейке консервативности $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$. Вычисляются координаты точки интерполирования температуры, являющейся точкой пересечения $R_0^{(1)*}$ прямой, нормальной к общей грани $\Gamma 1$, с одним из треугольников в ячейке $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$, и определяется значение температуры $T_0^{(1)*}$ в этой точке. У величин $R_0^{(1)*}$ и $T_0^{(1)*}$ нижний индекс 0 указывает номер ячейки, в которой они определены ($\Omega 0$), а верхний (γ), $\gamma = \overline{1,6}$, — номер грани, для которой вычисляется производная $\dfrac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}$.

Разностная производная температуры по нормали на грани $\Gamma 1$ вычисляется по формуле

$$\frac{\partial T}{\partial N^{(1)}} = \frac{T_1^* - T_0^{(1)*}}{h_1}, \tag{51}$$

где $h_1 = \sqrt{\left(x_1^* - x_0^{(1)*}\right)^2 + \left(y_1^* - y_0^{(1)*}\right)^2 + \left(z_1^* - z_0^{(1)*}\right)^2}$ — длина отрезка $R_1^*R_0^{(1)*}$.

Найдем точку пересечения R_1^* прямой, проходящей в направлении нормали $\vec{N}^{(1)} = (N_x^{(1)}, N_y^{(1)}, N_z^{(1)})$ (32) через центральную точку $G1$ грани $\Gamma 1$, с одним из треугольников $R_{C1}R_1R_2$, $R_{C1}R_2R_3$, $R_{C1}R_3R_4$, $R_{C1}R_4R_1$, расположенных в ячейке сетки $\Omega 1 \equiv \Omega_{k-1,\,i,\,l}$ (см. рис. 7). Чтобы не загромождать изображение, на рис. 8 представлен только треугольник $R_{C1}R_1R_2$, с пересекающей его *нормальной* прямой. Точка $\vec{A} \equiv R_A$ — это конец единичного вектора нормали, исходящего из точки $G1$, так что $\vec{A} - \vec{G}1 = \vec{N}^{(1)}$.

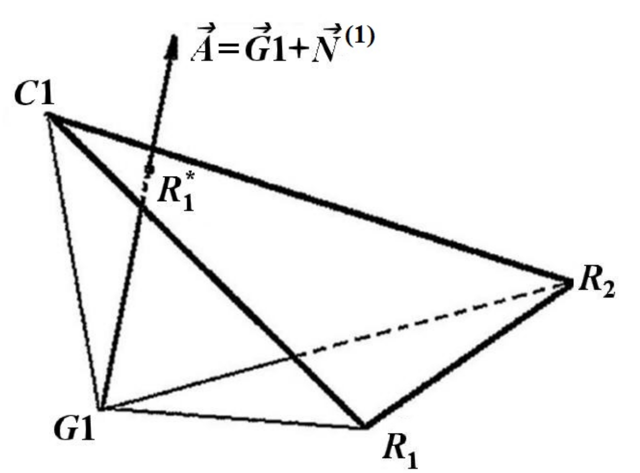

Рис. 8. Пересечение *нормальной* прямой с треугольником $R_{C1}R_1R_2$

Уравнение плоскости, проходящей через три точки R_{C1}, R_1, R_2, имеет следующий вид [16]:

$$\begin{vmatrix} x - x_{C1} & y - y_{C1} & z - z_{C1} \\ x_1 - x_{C1} & y_1 - y_{C1} & z_1 - z_{C1} \\ x_2 - x_{C1} & y_2 - y_{C1} & z_2 - z_{C1} \end{vmatrix} = 0,$$

или, что то же самое:

$$(x - x_{C1})\, S^{YZ}_{C1,1,2} + (y - y_{C1})\, S^{ZX}_{C1,1,2} + (z - z_{C1})\, S^{XY}_{C1,1,2} = 0, \tag{52}$$

где $S^{YZ}_{C1,1,2}$, $S^{ZX}_{C1,1,2}$, $S^{XY}_{C1,1,2}$ — площади проекций треугольника $R_{C1}R_1R_2$ на координатные плоскости OYZ, OZX, OXY соответственно. Параметрическое уравнение прямой, проходящей через точку $G1$ в направлении единичной нормали $\vec{N}^{(1)}$, записывается в виде

$$x = x_{G1} + N^{(1)}_x W, \quad y = y_{G1} + N^{(1)}_y W, \quad z = z_{G1} + N^{(1)}_z W. \tag{53}$$

Подставив координаты (53) в уравнение плоскости (52), получим

$$\left(N^{(1)}_x S^{YZ}_{C1,1,2} + N^{(1)}_y S^{ZX}_{C1,1,2} + N^{(1)}_z S^{XY}_{C1,1,2}\right) W = \\ = -\,(x_{G1} - x_{C1})\, S^{YZ}_{C1,1,2} - (y_{G1} - y_{C1})\, S^{ZX}_{C1,1,2} - (z_{G1} - z_{C1})\, S^{XY}_{C1,1,2}.$$

Отсюда с учетом равенства $-S_{C1,1,2} = S_{C1,2,1}$ следует, что параметр W в точке пересечения прямой (53) с плоскостью (52) принимает значение

$$W = \frac{(x_{G1} - x_{C1})\, S^{YZ}_{C1,2,1} + (y_{G1} - y_{C1})\, S^{ZX}_{C1,2,1} + (z_{G1} - z_{C1})\, S^{XY}_{C1,2,1}}{N^{(1)}_x S^{YZ}_{C1,1,2} + N^{(1)}_y S^{ZX}_{C1,1,2} + N^{(1)}_z S^{XY}_{C1,1,2}}, \tag{54}$$

а координаты искомой точки пересечения $\vec{R}^*_1 = (x^*_1,\, y^*_1,\, z^*_1)$ выражаются формулами

$$x^*_1 = x_{G1} + N^{(1)}_x W, \quad y^*_1 = y_{G1} + N^{(1)}_y W, \quad z^*_1 = z_{G1} + N^{(1)}_z W, \tag{55}$$

где W определяется равенством (54).

Выразим координаты (55) точки пересечения $\vec{R}^*_1$ через барицентрические координаты относительно четырех базисных точек $\vec{R}_1 = (x_1,\, y_1,\, z_1)$, $\vec{R}_2 = (x_2,\, y_2,\, z_2)$, $\vec{R}_{C1} = (x_{C1},\, y_{C1},\, z_{C1})$, $\vec{R}_{G1} = (x_{G1},\, y_{G1},\, z_{G1})$ (см. рис. 8), которые являются вершинами тетраэдра $\vec{R}_{C1}\vec{R}_2\vec{R}_1\vec{R}_{G1}$ и не лежат в одной плоскости.

Барицентрические координаты в трехмерном пространстве определяются четырьмя числами a, b, c, d, которые для любой точки, в данном случае $\vec{R}^*_1 = (x^*_1,\, y^*_1,\, z^*_1)$, удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{aligned} & a + b + c + d = 1; \\ & a x_1 + b x_2 + c x_{C1} + d x_{G1} = x^*_1; \\ & a y_1 + b y_2 + c y_{C1} + d y_{G1} = y^*_1; \\ & a z_1 + b z_2 + c z_{C1} + d z_{G1} = z^*_1. \end{aligned}$$

В результате решения этой системы получим выражения для барицентрических координат a_1, b_1, c_1, d_1 точки $\vec{R}^*_1$ через ее декартовы координаты:

$$a_1 = \frac{1}{P_{G1,1,2}} \left[(x^*_1 - x_{G1})\, S^{YZ}_{G1,2,C1} + (y^*_1 - y_{G1})\, S^{ZX}_{G1,2,C1} + (z^*_1 - z_{G1})\, S^{XY}_{G1,2,C1}\right]; \tag{56}$$

$$b_1 = \frac{1}{P_{G1,1,2}} \left[(x^*_1 - x_{G1})\, S^{YZ}_{G1,C1,1} + (y^*_1 - y_{G1})\, S^{ZX}_{G1,C1,1} + (z^*_1 - z_{G1})\, S^{XY}_{G1,C1,1}\right]; \tag{57}$$

$$c_1 = \frac{1}{P_{G1,1,2}} \left[(x^*_1 - x_{G1})\, S^{YZ}_{G1,1,2} + (y^*_1 - y_{G1})\, S^{ZX}_{G1,1,2} + (z^*_1 - z_{G1})\, S^{XY}_{G1,1,2}\right]; \tag{58}$$

$$d_1 = 1 - a_1 - b_1 - c_1, \tag{59}$$

где

$$P_{G1,1,2} = (x_{C1} - x_{G1})\, S^{YZ}_{G1,1,2} + (y_{C1} - y_{G1})\, S^{ZX}_{G1,1,2} + (z_{C1} - z_{G1})\, S^{XY}_{G1,1,2}. \tag{60}$$

Подставив в (56)—(58) координаты точки $\vec{R}_1^*$ (55), получим

$$a_1 = \frac{W}{P_{G1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,2,C1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,2,C1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,2,C1}^{XY} \right); \tag{61}$$

$$b_1 = \frac{W}{P_{G1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,C1,1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,C1,1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,C1,1}^{XY} \right); \tag{62}$$

$$c_1 = \frac{W}{P_{G1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,1,2}^{XY} \right), \tag{63}$$

где W определяется формулой (54).

Заметим, что числитель дроби в правой части формулы (54) и знаменатель $P_{G1,1,2}$ (60) в правой части формул (61)—(63) выражают утроенный объем одного и того же тетраэдра $R_{C1}R_2R_1R_{G1} \equiv \equiv R_{G1}R_1R_2R_{C1}$, изображенного на рис. 8, и поэтому равны между собой. С учетом этого формулы для барицентрических координат (61)—(63) приводятся к следующему виду, который не содержит декартовых координат точки $\vec{R}_1^*$:

$$a_1 = \frac{1}{P_{C1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,2,C1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,2,C1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,2,C1}^{XY} \right); \tag{64}$$

$$b_1 = \frac{1}{P_{C1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,C1,1}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,C1,1}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,C1,1}^{XY} \right); \tag{65}$$

$$c_1 = \frac{1}{P_{C1,1,2}} \left(N_x^{(1)} S_{G1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{G1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{G1,1,2}^{XY} \right), \tag{66}$$

где $P_{C1,1,2} = N_x^{(1)} S_{C1,1,2}^{YZ} + N_y^{(1)} S_{C1,1,2}^{ZX} + N_z^{(1)} S_{C1,1,2}^{XY}$.

Непосредственной проверкой можно убедиться, что имеет место равенство $a_1 + b_1 + c_1 = 1$. Для этого в формулах (64)—(66) площади проекций треугольников нужно выразить через координаты их вершин и провести необходимые вычисления. Тогда в соответствии с (59) имеем: $d_1 = 1 - a_1 - - b_1 - c_1 = 0$.

Таким образом, координаты точки пересечения $\vec{R}_1^* = (x_1^*,\, y_1^*,\, z_1^*)$ (см. рис. 8) можно вычислять по формулам

$$x_1^* = a_1 x_1 + b_1 x_2 + c_1 x_{C1}; \quad y_1^* = a_1 y_1 + b_1 y_2 + c_1 y_{C1}; \quad z_1^* = a_1 z_1 + b_1 z_2 + c_1 z_{C1}, \tag{67}$$

где (x_{C1}, y_{C1}, z_{C1}), (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) — соответственно координаты вершин $\vec{R}_{C1}$, $\vec{R}_1$ и $\vec{R}_2$ треугольника $R_{C1}R_1R_2$ (см. рис. 8), в котором содержится точка $\vec{R}_1^*$; значения a_1, b_1 вычисляются по формулам (64), (65); $c_1 = 1 - a_1 - b_1$. Но прежде чем воспользоваться формулами (67), среди интерполяционных треугольников $R_{C1}R_1R_2$, $R_{C1}R_2R_3$, $R_{C1}R_3R_4$, $R_{C1}R_4R_1$, (см. рис. 7) нужно найти тот, для которого $a_1 \geq 0$, $b_1 \geq 0$, $c_1 \geq 0$. Именно в этом треугольнике будет лежать точка пересечения $\vec{R}_1^*$.

Эти же барицентрические координаты используются для вычисления значения температуры T_1^* в точке пересечения $\vec{R}_1^*$:

$$T_1^* = a_1 T_1 + b_1 T_2 + c_1 T_{C1}, \tag{68}$$

где T_1, T_2 — усредненные по ячейкам значения температуры в узлах сетки $\vec{R}_1$ и $\vec{R}_2$.

Аналогично вычисляются координаты точки $R_0^{(1)*}$ пересечения нормальной прямой, проходящей через центральную точку грани Г1, с одним из интерполяционных треугольников, расположенных в ячейке консервативности Ω0. Значение температуры в точке $R_0^{(1)*}$ вычисляется по формуле

$$T_0^{(1)*} = a_0^{(1)} T_1 + b_0^{(1)} T_2 + c_0^{(1)} T_{C0},$$

которая отличается от (68) только тем, что в ней используется температура T_{C0} в центральной точке ячейки Ω0. Барицентрические координаты $a_0^{(1)}$, $b_0^{(1)}$, $c_0^{(1)}$ точки $R_0^{(1)*}$ также отличаются от барицентрических координат точки R_1^* (64)—(66) только тем, что в аналогичных формулах вместо точки $C1$ в них всюду используется центральная точка $C0$ ячейки консервативности $\Omega 0$.

После того, как найдены обе точки пересечения R_1^*, $R_0^{(1)*}$ и значения температуры T_1^*, $T_0^{(1)*}$ в этих точках, разностное выражение для производной температуры по нормали, проведенной из центра грани $\Gamma 1$, определяется формулой (51).

Аналогично вычисляются потоки для остальных граней.

Линеаризация уравнений теплового баланса

Запишем разностный аналог закона сохранения энергии (26) для внутренней ячейки сетки $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,i,l}$ ($k = 2, \ldots, N_k - 2$; $i = 2, \ldots, N_i - 2$; $l = 2, \ldots, N_l - 2$) в следующем виде:

$$M_0 \frac{E_0^{n+1} - E_0^n}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\gamma=1}^{6} S_\gamma \chi_{0\gamma}^{n+1} \frac{\left(T_\gamma^*\right)^{n+1} - \left(T_0^{(\gamma)*}\right)^{n+1}}{h_\gamma}, \tag{69}$$

где $\dfrac{\left(T_\gamma^*\right)^{n+1} - \left(T_0^{(\gamma)*}\right)^{n+1}}{h_\gamma} = \left(\dfrac{\partial T}{\partial N^{(\gamma)}}\right)^{n+1}$ — разностная производная температуры по нормали к грани $\Gamma\gamma$ ячейки $\Omega 0$; h_γ — шаг по пространству между точками $\vec{R}_\gamma^*$ и $\vec{R}_0^{(\gamma)*}$.

В уравнениях теплового баланса для приграничных ячеек сетки нужно учитывать граничные условия.

Пусть, например, на одной из граней Γm приграничной ячейки задана граничная температура $T = T_{\Gamma m}$ (2). В этом случае полагаем: $\vec{R}_m^* = \vec{R}_{Gm}$, где $\vec{R}_{Gm}$ — центральная точка грани. Значение температуры в этой точке берется равным заданной граничной температуре: $T_m^* = T_{\Gamma m}$.

Предположим, что на некоторой грани Γn приграничной ячейки $\Omega 0$ в явном виде задан поток тепла $Q = Q_{\Gamma n}$ (3). Тогда уравнение теплового баланса (69) для этой ячейки можно записать в следующем виде:

$$M_0 \frac{E_0^{n+1} - E_0^n}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\substack{\gamma \neq n \\ \gamma=1}}^{6} S_\gamma \chi_{0\gamma}^{n+1} \frac{\left(T_\gamma^*\right)^{n+1} - \left(T_0^{(\gamma)*}\right)^{n+1}}{h_\gamma} + S_n Q_{\Gamma n}.$$

Пусть на грани Γq ячейки консервативности $\Omega 0$ задано граничное условие типа *свободная поверхность* (4). Особенность этого условия состоит в том, что функция потока излучения на свободной поверхности является нелинейной функцией температуры. В данной работе используется неявная аппроксимация этого граничного условия. Уравнение теплового баланса записывается в виде

$$M_0 \frac{E_0^{n+1} - E_0^n}{\tau^{n+1/2}} = \sum_{\substack{\gamma \neq q \\ \gamma=1}}^{6} S_\gamma \chi_{0\gamma}^{n+1} \frac{\left(T_\gamma^*\right)^{n+1} - \left(T_0^{(\gamma)*}\right)^{n+1}}{h_\gamma} + S_q \Phi_0^{n+1}, \tag{70}$$

где $\Phi_0^{n+1} = -0{,}25\sigma c \left(T_0^{n+1}\right)^4$.

Заметим, что приграничная ячейка сетки может иметь одну, две или три граничные грани. Тип граничного условия на каждой из этих граней нужно рассматривать отдельно.

Зависимость внутренней энергии от температуры $E = E\left(\rho, T\right)$ в уравнении теплопроводности (1) в общем случае является нелинейной. Поэтому и система уравнений (69) нелинейна относительно искомых значений температуры. Для ее решения используется итерационный метод типа метода Ньютона. Применяется линеаризация путем разложения функции $E = E\left(\rho, T\right)$ в ряд Тейлора по степеням приращения температуры на итерациях:

$$E_{k,i,l}^{\nu+1} = E_{k,i,l}^{\nu} + K_{k,i,l}^{\nu} \left(T_{k,i,l}^{\nu+1} - T_{k,i,l}^{\nu}\right) + O\left(\delta_{k,i,l}^2\right),$$

где ν — номер итерации по нелинейности; $K(\rho, T) = \dfrac{\partial E(\rho, T)}{\partial T}$; слагаемые, квадратичные по $\delta_{k,i,l} = T^{n+1}_{k,i,l} - T^{n}_{k,i,l}$, отбрасываются. В предположении, что итерации по нелинейности уравнения состояния $E = E(\rho, T)$ сошлись, имеют место равенства

$$\left\{T^{n+1}_{k,i,l}\right\} = \left\{T^{\nu+1}_{k,i,l}\right\}; \quad \left\{E^{n+1}_{k,i,l}\right\} = \left\{E^{\nu+1}_{k,i,l}\right\}, \quad \text{где} \quad E^{\nu+1}_{k,i,l} = E\left(\rho_{k,i,l}, T^{\nu+1}_{k,i,l}\right).$$

Тогда приращение удельной внутренней энергии на шаге по времени в ячейке сетки $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,i,l}$ представляется в виде

$$E^{n+1}_{k,i,l} - E^{n}_{k,i,l} = E^{\nu+1}_{k,i,l} - E^{n}_{k,i,l} = K^{\nu}_{k,i,l}\left(T^{\nu+1}_{k,i,l} - T^{\nu}_{k,i,l}\right) + E^{\nu}_{k,i,l} - E^{n}_{k,i,l}.$$

Подставив в уравнения (69), получим

$$\frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} K^{\nu}_0 \left(T^{\nu+1}_0 - T^{\nu}_0\right) + \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} \left(E^{\nu}_0 - E^{n}_0\right) = \sum_{\gamma=1}^{6} S_\gamma \chi^{\nu}_{0\gamma} \frac{\left(T^{*}_\gamma\right)^{\nu+1} - \left(T^{(\gamma)*}_0\right)^{\nu+1}}{h_\gamma}. \tag{71}$$

Система линейных уравнений (71) служит для итерационного вычисления новых значений температуры $T^{n+1} = \left\{T^{n+1}_{k,i,l}\right\}$ и энергии $E^{n+1} = \left\{E^{n+1}_{k,i,l} = E\left(\rho_{k,i,l}, T^{n+1}_{k,i,l}\right)\right\}$. При этом параллельно с вычислением температуры в итерационный процесс в режиме простой итерации вовлекается и вычисление коэффициентов теплопроводности $\chi^{n+1} = \left\{\chi^{n+1}_{k,i,l} = \chi\left(\rho_{k,i,l}, T^{n+1}_{k,i,l}\right)\right\}$, зависящих от температуры. Условия сходимости такого итерационного процесса исследовались, например, в работе [17]. Иногда в целях экономии времени счета в процессе проведения итераций рекомендуется ограничиться двумя-тремя итерациями по нелинейности коэффициента теплопроводности. Устойчивость счета тепловых волн при такой организации итерационного процесса исследовалась в работах [18, 19].

Нелинейное граничное условие $\Phi^{n+1}_0 = -0{,}25\sigma c\left(T^{n+1}_0\right)^4$, задающее поток излучения на некоторой грани $\Gamma\gamma$ приграничной ячейки $\Omega 0$ (70), линеаризуется по методу Ньютона. Соответственно итерационный процесс вычисления $\Phi^{\nu+1}_0$, совмещенный с итерациями по нелинейности уравнения состояния и коэффициентов теплопроводности, проводится в режиме итераций по методу Ньютона, а не в режиме простой итерации. Линеаризация функции $\Phi(T)$ проводится по аналогии с уравнением состояния $E = E(\rho, T)$. Записывается разложение функции потока излучения в ряд Тейлора по степеням приращения температуры на итерациях по нелинейности, и после отбрасывания квадратичных слагаемых имеем

$$\Phi^{\nu+1}_0 = \Phi^{\nu}_0 - \sigma c\left(T^{\nu}_0\right)^3\left(T^{\nu+1}_0 - T^{\nu}_0\right) = -0{,}25\sigma c\left(T^{\nu}_0\right) - \sigma c\left(T^{\nu}_0\right)^3\left(T^{\nu+1}_0 - T^{\nu}_0\right). \tag{72}$$

С учетом выражения для потока излучения на итерациях $\Phi^{\nu+1}_0$ (72) получаем линейное относительно температуры на итерациях уравнение теплового баланса в приграничной ячейке сетки $\Omega 0$:

$$\frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} K^{\nu}_0 \left(T^{\nu+1}_0 - T^{\nu}_0\right) + \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} \left(E^{\nu}_0 - E^{n}_0\right) =$$
$$= \sum_{\substack{\gamma=1 \\ \gamma\neq q}}^{6} S_\gamma \chi^{\nu}_{0\gamma} \frac{\left(T^{*}_\gamma\right)^{\nu+1} - \left(T^{(\gamma)*}_0\right)^{\nu+1}}{h_\gamma} - S_q \sigma c\left(T^{\nu}_0\right)^3\left(T^{\nu+1}_0 - T^{\nu}_0\right) - 0{,}25 S_q \sigma c\left(T^{\nu}_0\right)^4.$$

Коэффициенты линеаризованных уравнений

Запишем линеаризованное уравнение теплового баланса для ячейки консервативности $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,i,l}$ в следующем виде:

$$\Lambda^{\nu}_0 T^{\nu+1}_0 - \sum_{\gamma=1}^{6} Q^{\nu+1}_\gamma = F_0, \tag{73}$$

где

$$\Lambda_0^\nu = \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} K_0^\nu; \quad F_0 = \frac{M_0}{\tau^{n+1/2}} \left[K_0^\nu T_0^\nu - (E_0^\nu - E_0^n) \right];$$
$$Q_\gamma^{\nu+1} = \frac{S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu}{h_\gamma} \left[\left(T_\gamma^*\right)^{\nu+1} - \left(T_0^{(\gamma)*}\right)^{\nu+1} \right], \quad \gamma = \overline{1,\,6}. \tag{74}$$

Учитывая, что в формулах для потоков (74) используются усредненные по ячейкам значения температуры в узлах сетки, эти потоки можно представить в следующем виде:

$$Q_\gamma^{\nu+1} = \frac{S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu}{h_\gamma} \sum_{m=0}^{26} \lambda_m^{(\gamma)} T_m^{\nu+1} = \sum_{m=0}^{26} \left(\Lambda_m^{(\gamma)}\right)^\nu T_m^{(\nu+1)}, \tag{75}$$

где

$$\left(\Lambda_m^{(\gamma)}\right)^\nu = \frac{S_\gamma \chi_{0\gamma}^\nu}{h_\gamma} \lambda_m^{(\gamma)}, \quad \gamma = \overline{1,\,6}, \quad m = 0,\,1,\,\ldots,\,26.$$

Нижний индекс m при значениях температуры T_m и совпадающий с ним нижний индекс при коэффициентах $\lambda_m^{(\gamma)}$ в формуле (75) обозначают локальный номер ячейки сетки (44)—(49), в которой определена температура. Заметим, что в этой формуле на каждой грани реально могут использоваться значения температуры не более чем в 18 ячейках сетки (см. рис. 4—6). Остальные коэффициенты полагаются равными нулю.

Нужно выразить коэффициенты при значениях температуры линеаризованной системы уравнений теплового баланса через коэффициенты в формулах для тепловых потоков (75) на гранях ячейки сетки. Для этого запишем уравнение (73), представляя его левую часть в виде линейной комбинации 27 значений температуры в ячейках сетки, составляющих сеточный шаблон (см. рис. 4—6) для ячейки консервативности $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$:

$$\sum_{m=0}^{26} A_m^\nu T_m^{\nu+1} = F_0. \tag{76}$$

Далее, подставив выражения (75) для тепловых потоков на гранях ячейки $\Omega 0$ в левую часть уравнения (73), получим следующие формулы для коэффициентов A_m^ν, $m = 0,\,1,\ldots,\,26$, при неизвестных значениях температуры $T_m^{\nu+1}$ в уравнении (76):

$$A_0^\nu = \Lambda_0^\nu - \sum_{\gamma=1}^{6} \left(\Lambda_0^{(\gamma)}\right)^\nu; \quad A_m^\nu = -\sum_{\gamma=1}^{6} \left(\Lambda_m^{(\gamma)}\right)^\nu, \quad m = \overline{1,\,26}. \tag{77}$$

После того, как будут вычислены все коэффициенты $\left(\Lambda_m^{(\gamma)}\right)^\nu$ при температурах $T_m^{\nu+1}$ в формулах для тепловых потоков (75), по формулам (77) найдем численные значения коэффициентов при неизвестных температурах в уравнении (76).

Представим краткое описание алгоритма вычисления коэффициентов $\lambda_m^{(\gamma)}$ в правой части одной из формул (75), записанной для разности $\Delta T_\gamma = T_\gamma^* - T_0^{(\gamma)*}$ из (74) на некоторой грани $\Gamma\gamma$ ячейки $\Omega 0 \equiv \Omega_{k,\,i,\,l}$.

Сначала по формулам (32) вычисляются координаты единичной нормали $\vec{N}^{(\gamma)}$ к рассматриваемой грани. Определяются центральные точки соседствующих ячеек $\Omega 0$ и $\Omega\gamma$. Центральные точки каждой из двух ячеек соединяются отрезками прямых с вершинами их общей грани $\Gamma\gamma$. При этом в каждой из ячеек образуется по четыре пространственных треугольника. Прямая линия $\Pi\gamma$, проходящая через центральную точку рассматриваемой грани в направлении нормали, пересекает один из треугольников в ячейке $\Omega 0$ и один из треугольников в ячейке $\Omega\gamma$. Для поиска этих треугольников используются барицентрические координаты a, b, подобные вычисляемым по (64), (65), и $c = 1 - a - b$.

После того, как оба треугольника, $R_{C\gamma}R_{j\gamma}R_{j\gamma+1}$ (в ячейке $\Omega\gamma$) и $R_{C0}R_{j0}R_{j0+1}$ (в ячейке $\Omega0$), найдены, с помощью тех же барицентрических координат вычисляются координаты точек пересечения (67), а также значения температуры T^*_γ и $T_0^{(\gamma)*}$ в этих точках. Тогда

$$\Delta T_\gamma = T^*_\gamma - T_0^{(\gamma)*} = a_\gamma T_{j\gamma} + b_\gamma T_{j\gamma+1} + c_\gamma T_{C\gamma} - a_0^{(\gamma)} T_{j0} - b_0^{(\gamma)} T_{j0+1} - c_0^{(\gamma)} T_{C0}.$$

Подставив сюда выражения для усредненных значений температуры в узлах сетки $R_{j\gamma}$, $R_{j\gamma+1}$, R_{j0}, R_{j0+1}, после перегруппировки слагаемых получим искомые коэффициенты $\lambda_m^{(\gamma)}$ при значениях температуры в формулах для тепловых потоков (75).

В заключение приведем запись линеаризованной системы уравнений теплового баланса (76), используя вместо локальной нумерации ячеек сетки глобальную индексацию значений температуры в ячейках сетки и положив $Am^\nu_{k,\,i,\,l} \equiv A^\nu_m$:

$$\begin{aligned} & A0^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i,\,l} + A1^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i,\,l} + A2^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i,\,l} + A3^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i-1,\,l} + A4^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i+1,\,l} + \\ &\quad + A5^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i,\,l-1} + A6^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i,\,l+1} + A7^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i-1,\,l} + A8^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i+1,\,l} + \\ &\quad + A9^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i,\,l-1} + A10^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i,\,l+1} + A11^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i-1,\,l} + A12^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i+1,\,l} + \\ &\quad + A13^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i,\,l-1} + A14^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i,\,l+1} + A15^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i-1,\,l-1} + A16^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i+1,\,l-1} + \\ &\quad + A17^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i+1,\,l+1} + A18^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k,\,i-1,\,l+1} + A19^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i-1,\,l-1} + A20^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i+1,\,l-1} + \\ &\quad + A21^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i+1,\,l+1} + A22^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k-1,\,i-1,\,l+1} + A23^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i-1,\,l-1} + A24^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i+1,\,l-1} + \\ &\quad + A25^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i+1,\,l+1} + A26^\nu_{k,\,i,\,l}T^{\nu+1}_{k+1,\,i-1,\,l+1} = F_{k,\,i,\,l}. \end{aligned} \tag{78}$$

Система линейных уравнений (78) служит для итерационного решения нелинейных уравнений теплового баланса (69), т. е. для вычисления новых значений температуры $T^{n+1} = \left\{T^{n+1}_{k,\,i,\,l}\right\}$ и энергии $E^{n+1} = \left\{E^{n+1}_{k,\,i,\,l} = E\left(\rho_{k,\,i,\,l}, T^{n+1}_{k,\,i,\,l}\right)\right\}$ на шаге по времени. Для получения решения системы (78) можно использовать одну из библиотек решателей систем линейных уравнений, например [20].

Заключение

Представлена разностная схема решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на структурированной непрямоугольной сетке, состоящей из произвольных шестигранников с линейчатыми гранями. Разностная схема строится на основе разностного аналога закона сохранения энергии, записанного для ячеек пространственной сетки, является полностью неявной, без расщепления по пространственным направлениям. Используется аппроксимация тепловых потоков на гранях ячеек сетки, предложенная для двумерного случая в методике СИГМА.

Последовательно придерживаясь изначально принятого соглашения о линейчатости граней ячейки, получены формулы для объема ячейки и вектора нормали в центре грани ячейки. Дается определение площади грани, через которую ячейка обменивается теплом, основанное на понятии векторной, или ориентированной, площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве.

Показано, что барицентрические координаты точек, в которых определяются интерполированные температуры для вычисления тепловых потоков, можно получить еще до того, как вычислены декартовы координаты этих точек. Это значительно упрощает вычисления.

Список литературы

1. *Яненко Н. Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.
   Yanenko N. N. Metod drobnykh shagov resheniya mnogomernykh zadach matematicheskoy fiziki. Novosibirsk: Nauka, 1967.

2. *Годунов С. К., Рябенький В. С.* Введение в теорию разностных схем. М.: Физматлит, 1962.
Godunov S. K., Ryabenkiy V. S. Vvedenie v teoriyu raznostnykh skhem. M.: Fizmatlit, 1962.

3. *Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф., Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бакулина Е. А., Безрукова И. Ю., Борляев В. В., Володина Н. А., Наумов А. О., Огнева Н. Э., Резвова Т. В., Резяпов А. А., Стародубов С. В., Тарадай И. Ю., Тихонова А. П., Циберев К. В., Шанин А. А., Ширшова М. О., Шувалова Е. В.* Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41—50.
Bakhrakh S. M., Velichko S. V., Spiridonov V. F., Avdeev P. A., Artamonov M. V., Bakulina E. A., Bezrukova I. Yu., Borlyaev V. V., Volodina N. A., Naumov A. O., Ogneva N. E., Rezvova T. V., Rezyapov A. A., Starodubov S. V., Taraday I. Yu., Tikhonova A. P., Tsiberev K. V., Shanin A. A., Shirshova M. O., Shuvalova E. V. Metodika LEGAK-3D rascheta trekhmernykh nestatsionarnykh techeniy mnogokomponentnoy sploshnoy sredy i printsipy ee realizatsii na mnogoprotsessornykh EVM s raspredelennoy pamyatyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2004. Vyp. 4. S. 41—50.

4. *Алексеев А. В., Беляков И. М., Бочков А. И., Евдокимов В. В., Ириничев Е. А., Морозов В. Ю., Москвин А. Н., Нуждин А. А., Пепеляев М. П., Резчиков В. Ю., Сучкова В. В., Шагалиев Р. М., Шарифуллин Э. Ш., Шемякина Т. В., Шумилин В. А.* Методика САТУРН-2005. Математические модели, алгоритмы и программы решения многомерных задач переноса частиц и энергии // Там же. 2013. Вып. 4. С. 17—30.
Alekseev A. V., Belyakov I. M., Bochkov A. I., Evdokimov V. V., Irinichev E. A., Morozov V. Yu., Moskvin A. N., Nuzhdin A. A., Pepelyaev M. P., Rezchikov V. Yu., Suchkova V. V., Shagaliev R. M., Sharifullin E. Sh., Shemyakina T. V., Shumilin V. A. Metodika SATURN-2005. Matematicheskie modeli i programmy resheniya mnogomernykh zadach perenosa chastits i energii // Tam zhe. 2013. Vyp. 4. S. 17—30.

5. *Трощиёв В. Е., Шагалиев Р. М.* Класс интерполяционно-инвариантных схем для численного решения уравнения теплопроводности // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. Вып. 3. С. 73—76.
Troshchiev V. E., Shagaliev R. M. Klass interpolyatsionno-invariantnykh skhem dlya chislennogo resheniya uravneniya teploprovodnosti // Tam zhe. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1983. Vyp. 3. S. 73—76.

6. *Панов А. И., Соболев И. В.* Трехмерная методика расчета диффузионных процессов на неструктурированных сетках // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 46—54.
Panov A. I., Sobolev I. V. Trekhmernaya metodika rascheta diffusionnykh protsessov na nestrukturirovannykh setkakh // Tam zhe. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2007. Vyp. 1. S. 46—54.

7. *Бабанов А. В., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Ватулин В. В., Винокуров О. А., Гречишкина И. Н., Змушко В. В., Измайлова Т. Б., Митрофанов Е. И., Рябикина Н. А., Шамраев Б. Н.* Методика МИМОЗА-НД3Д. Расчет трехмерных задач спектрального переноса излучения // Там же. 2012. Вып. 2. С. 64—72.
Babanov A. V., Belkov S. A., Bondarenko S. V., Vatulin V. V., Vinokurov O. A., Grechishkina I. N., Zmushko V. V., Izmaylova T. B., Mitrofanov E. I., Ryabikina N. A., Shamraev B. N. Metodika MEMOZA-ND3D. Raschet tryekhmernykh zadach spektralnogo perenosa izlucheniya // Tam zhe. 2012. Vyp. 2. S. 64—72.

8. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
Zeldovich Ya. B., Rayzer Yu. P. Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy. M.: Nauka, 1966.

9. *Стенин А. М.* Явная полностью консервативная вариационная разностная схема для решения системы уравнений газовой динамики в переменных Лагранжа // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 1. С. 3—16.
   Stenin A. M. Yavnaya polnostyu konservativnaya variatsionnaya raznostnaya schema dlya resheniya sistemy uravneniy gazovoy dinamiki v peremennykh Lagranzha // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2012. Vyp. 1. S. 3—16.

10. *Стенин А. М.* Явная полностью консервативная вариационная разностная схема для решения системы уравнений газовой динамики в переменных Лагранжа // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2014. Вып. 19, ч. 1. С. 44—57.
    Stenin A. M. Yavnaya polnostyu konservativnaya variatsionnaya raznostnaya skhhema dlya resheniya sistemy uravneniy gazovoy dinamiki v peremennykh Lagranzha // Trudy RFYaTs-VNIIEF. 2014. Vyp. 19, ch. 1. S. 44—57.

11. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. М.: Наука, 1977.
    Korn G., Korn T. Spravochnik po matematike. M.: Nauka, 1977.

12. *Авдошина Е. В., Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А., Дмитриева Ю. С., Наумов А. О., Проневич С. Н., Рудько Н. М., Тихомиров Б. П.* Исследование точности различных методов усреднения коэффициента теплопроводности на стороне ячейки интегрирования при численном решении уравнения теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 3. С. 32—46.
    Avdoshina E. V., Bondarenko Yu. A., Gorbunov A. A., Dmitrieva Yu. S., Naumov A. O., Pronevich S. N., Rudko N. M., Tikhomirov B. P. Issledovanie tochnosti razlichnykh metodov usredneniya koeffitsienta teploprovodnosti na storone yacheiki integrirovaniya pri chislennom reshenii uravneniya teploprovodnosti // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2014. Vyp. 3. S. 32—46.

13. *Баталова М. В., Бахрах С. М., Винокуров О. А., Загускин В. Л., Иванова Л. Н., Калманович А. И., Шиндерман И. Д.* Комплекс СИГМА для расчета задач двумерной газодинамики // Всесоюз. семинар по численным методам механики вязкой жидкости: тез. докл. Новосибирск, 1969. С. 283.
    Batalova M. V., Bakhrakh S. M., Vinokurov O. A., Zaguskin V. L., Ivanova L. N., Kalmanovich A. I., Shinderman I. D. Kompleks SIGMA dlya rascheta zadach dvumernoy gazodinamiki // Vsesoyuz. seminar po chislennym metodam mekhaniki vyazkoy zhidkosti: tez. dokl. Novosibirsk, 1969. S. 283.

14. *Бондаренко Ю. А., Голубев А. А., Горбунов А. А., Наумов А. О., Панов А. И.* О "шахматном эффекте" в некоторых разностных схемах для двумерной и трехмерной теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 49—53.
    Bondarenko Yu. A., Golubev A. A., Gorbunov A. A., Naumov A. O., Panov A. I. O "shakhmatnom effekte" v nekotorykh raznostnykh skhemakh dlya dvumernoy i trekhmernoy teploprovodnosti // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2011. Vyp. 1. S. 49—53.

15. *Ильин В. А., Позняк Э. Г.* Аналитическая геометрия. М.: Наука, 1968.
    Ilyin V. A., Poznyak E. G. Analiticheskaya geometriya. M.: Nauka, 1968.

16. *Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.* Справочник по математике. М.: Госиздат, 1955.
    Bronshtein I. N., Semeendyaev K. A. Spravochnik po matematike. M.: Gosizdat, 1955.

17. *Волчинская М. И.* Об итерационной схеме решения квазилинейного уравнения теплопроводности // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1971. Т. 11, № 2. С. 518—520.
    Volchinskaya M. I. Ob iteratsionnoy skheme resheniya kvazilineynogo uravneniya teploprovodnosti // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1971. T. 11, № 2. S. 518—520.

18. *Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А.* Практические условия устойчивости для счета тепловых волн в неявных разностных схемах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 3. С. 3—12.

Bondarenko Yu. A., Gorbunov A. A. Prakticheskie usloviya ustoychivosti dlya scheta teplovykh voln v neyavnykh raznostnykh skhemakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2008. Vyp. 3. S. 3—12.

19. *Бондаренко Ю. А., Горбунов А. А., Тихомиров Б. П.* Практические условия устойчивости разностной схемы для решения уравнения теплопроводности с двукратным пересчетом значений коэффициента теплопроводности // Там же. 2016. Вып. 4. С. 20—25.
Bondarenko Yu. A., Gorbunov A. A., Tikhomirov B. P. Prakticheskie usloviya ustoychivosti raznostnoy skhemy dlya resheniya uravneniya teploprovodnosti s dvukratnym pereschetom znacheniy koeffitsienta teploprovodnosti // Tam zhe. 2016. Vyp. 4. S. 20—25.

20. *Карпов А. П., Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Петров Д. А., Стаканов А. Н., Щанникова Е. Б.* Решение СЛАУ в программных комплексах ИТМФ алгебраическими многосеточными методами // XVII межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование": сб. науч. трудов. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2019. С. 300—311.
Karpov A. P., Bartenev Yu. G., Erzunov V. A., Petrov D. A., Stakanov A. N., Shchannikova E. B. Reshenie SLAU v programmnykh kompleksakh ITMF algebraicheskimi mnogosetochnymi metodami // XVII mezhd. konf. "Supervychysleniya i matematicheskoe modelirovanie". Sarov: FGUP RFYaTs-VNIIEF ", 2019. S. 300—311.

Статья поступила в редакцию 19.03.2021.

УДК 539.3

ЧИСЛЕННАЯ МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ГАЗОВЫХ СТРУЙ С УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИМИ ПРЕГРАДАМИ

М. Х. Абузяров, Е. Г. Глазова, А. В. Кочетков, С. В. Крылов
(ННГУ им. Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород)

Излагается численная методика решения трехмерных задач взаимодействия высокоскоростных газовых струй с упругопластическими преградами. Методика построена на основе единого модифицированного разностного метода С. К. Годунова для расчета как энерговыделения при детонации и движения газа, так и динамического деформирования упругопластических преград. Методика реализует эйлерово-лагранжев подход с явным выделением подвижных контактных поверхностей с использованием многосеточных алгоритмов. Приводятся результаты численных исследований процесса образования газовой высокоскоростной струи в П-образных зарядах небольшого удлинения и ее взаимодействия с упругопластической стальной преградой. Численные результаты хорошо соответствуют известным экспериментальным данным.

Ключевые слова: численное моделирование, схема Годунова, повышенная точность, многосеточный подход, трехмерная задача, взрыв, детонация, высокоскоростные струи, упругопластическая преграда, взаимодействие, сравнение с экспериментом.

Введение

Газокумулятивные заряды находят применение в различных областях науки и техники. Так, например, они используются для разрушения тонкостенных элементов конструкций [1], разгона компактных тел до сверхвысоких скоростей [2—5] и пробивания преград различной природы [3, 6]. Изучение процессов, происходящих при детонации газокумулятивных зарядов, производилось ранее аналитическими и экспериментальными методами [3]. Однако в силу ограниченности возможностей как аналитических, так и экспериментальных подходов многие особенности протекающих процессов остаются невыясненными. Современные численные методы имеют гораздо больший потенциал и позволяют решать сложные нелинейные задачи, включающие генерацию и распространение ударных и детонационных волн (ДВ) в твердых телах и газах с возможными фазовыми переходами твердой фазы в газ и последующим ударно-волновым нагружением деформируемых тел и конструкций.

В данной работе для моделирования трехмерных быстропротекающих процессов и в газе, и в деформируемом теле используется единый численный метод — модифицированный метод С. К. Годунова [7—12]. Этот метод основан на интегрировании законов сохранения с использованием решения задачи распада разрыва в газе, деформируемом теле и на границе *газ — деформируемое тело*, имеет второй порядок аппроксимации на гладких решениях и обеспечивает монотонность на разрывных. Повышение точности достигается только за счет модификации решения задачи распада разрыва на шаге *предиктор* схемы путем сближения областей влияния разностной и дифференциальной задач.

Математическая постановка задачи

Постановка задачи (рис. 1, a) соответствует условиям проведения экспериментальных исследований [1]. На стальной массивной пластине находится П-образный заряд взрывчатого вещества (ВВ) небольшого удлинения. Инициирование детонации производится по верхней границе заряда. В расчетах использовались параметры ВВ ТГ50/50, близкие по плотности и скорости детонации к экспериментальным. Требуется описать в связанной постановке процессы распространения ДВ, формирования газокумулятивной струи в полости заряда и ее взаимодействия с упругопластической деформируемой преградой.

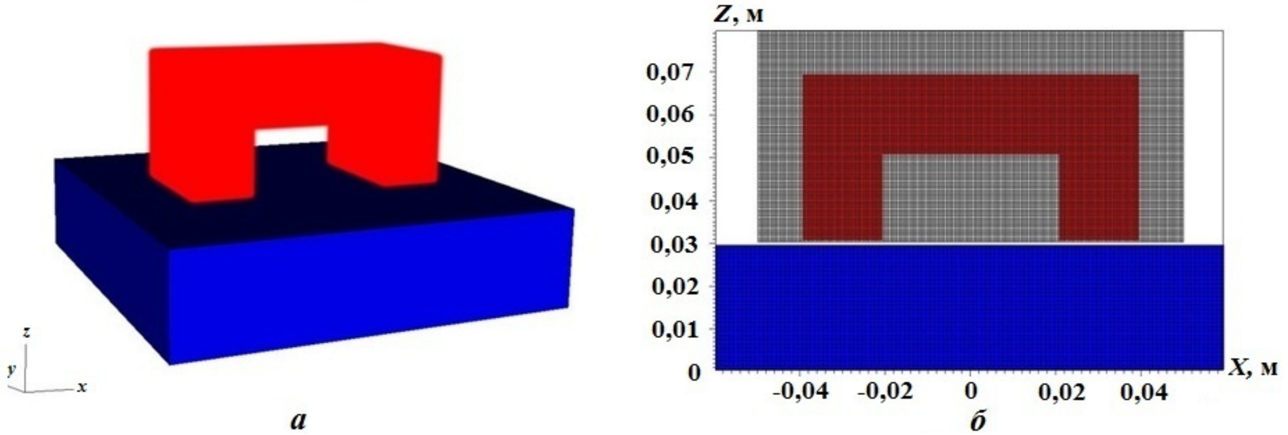

Рис. 1. Постановка задачи (a), расчетные области и сетки в сечении $Y = 0$ ($б$)

Для моделирования используются уравнения динамики сплошных сред в виде [13, 14]

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{f} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{g} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{h} = \mathbf{k}, \tag{1}$$

где $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \\ S_{xx} \\ S_{yy} \\ S_{zz} \\ S_{xy} \\ S_{xz} \\ S_{yz} \end{pmatrix}$; $\mathbf{f} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - S_{xx} \\ \rho uv - S_{xy} \\ \rho uw - S_{xz} \\ (e + p - S_{xx})\, u - S_{xy} v - S_{xz} w \\ u\left(S_{xx} - \dfrac{4}{3}\mu\right) \\ u\left(S_{yy} + \dfrac{2}{3}\mu\right) \\ u\left(S_{zz} + \dfrac{2}{3}\mu\right) \\ uS_{xy} - \mu v \\ uS_{xz} - \mu w \\ uS_{yz} \end{pmatrix}$;

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho u v - S_{xy} \\ \rho v^2 + p - S_{yy} \\ \rho u w - S_{yz} \\ (e + p - S_{yy})\, v - S_{xy} u - S_{yz} w \\ v\left(S_{xx} + \dfrac{2}{3}\mu\right) \\ v\left(S_{yy} - \dfrac{4}{3}\mu\right) \\ v\left(S_{zz} + \dfrac{2}{3}\mu\right) \\ v S_{xy} - \mu u \\ v S_{xz} \\ v S_{yz} - \mu w \end{pmatrix}; \quad \mathbf{h} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho v w - S_{xz} \\ \rho v w - S_{yz} \\ \rho w^2 + p - S_{zz} \\ (e + p - S_{zz})\, w - S_{yz} v - S_{xz} u \\ w\left(S_{xx} + \dfrac{2}{3}\mu\right) \\ w\left(S_{yy} + \dfrac{2}{3}\mu\right) \\ w\left(S_{zz} - \dfrac{4}{3}\mu\right) \\ w S_{xy} \\ w S_{xz} - \mu u \\ w S_{yz} - \mu v \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ S_{xx}\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) + S_{xy}\left(\dfrac{\partial u}{\partial y} - \dfrac{\partial v}{\partial x}\right) + S_{xz}\left(\dfrac{\partial u}{\partial z} - \dfrac{\partial w}{\partial x}\right) - \lambda S_{xx} \\ S_{xy}\left(\dfrac{\partial v}{\partial x} - \dfrac{\partial u}{\partial y}\right) + S_{yy}\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) + S_{yz}\left(\dfrac{\partial v}{\partial z} - \dfrac{\partial w}{\partial y}\right) - \lambda S_{yy} \\ S_{xz}\left(\dfrac{\partial w}{\partial x} - \dfrac{\partial u}{\partial z}\right) + S_{yz}\left(\dfrac{\partial w}{\partial y} - \dfrac{\partial v}{\partial z}\right) + S_{zz}\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) - \lambda S_{zz} \\ S_{xy}\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) - \dfrac{1}{2}\left(S_{xx} - S_{yy}\right)\left(\dfrac{\partial u}{\partial y} - \dfrac{\partial w}{\partial x}\right) + \dfrac{1}{2} S_{xz}\left(\dfrac{\partial v}{\partial z} - \dfrac{\partial w}{\partial y}\right) + \dfrac{1}{2} S_{yz}\left(\dfrac{\partial u}{\partial z} - \dfrac{\partial w}{\partial x}\right) - \lambda S_{xy} \\ S_{xz}\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) - \dfrac{1}{2}\left(S_{xx} - S_{zz}\right)\left(\dfrac{\partial u}{\partial y} - \dfrac{\partial w}{\partial x}\right) + \dfrac{1}{2} S_{xy}\left(\dfrac{\partial w}{\partial y} - \dfrac{\partial v}{\partial z}\right) + \dfrac{1}{2} S_{yz}\left(\dfrac{\partial u}{\partial z} - \dfrac{\partial w}{\partial x}\right) - \lambda S_{xy} \\ S_{yz}\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) - \dfrac{1}{2}\left(S_{yy} - S_{zz}\right)\left(\dfrac{\partial u}{\partial y} - \dfrac{\partial w}{\partial x}\right) + \dfrac{1}{2} S_{xz}\left(\dfrac{\partial v}{\partial x} - \dfrac{\partial u}{\partial y}\right) + \dfrac{1}{2} S_{xy}\left(\dfrac{\partial w}{\partial x} - \dfrac{\partial u}{\partial z}\right) - \lambda S_{yz} \end{pmatrix}.$$

Здесь ρ — плотность; p — давление; u, v, w — компоненты скорости по осям OX, OY, OZ; e — полная механическая энергия единицы объема сплошной среды, $e = \rho(\varepsilon + 0{,}5(u^2 + v^2 + w^2))$; ε — внутренняя энергия единицы массы; S_{xx}, S_{yy}, S_{zz}, S_{xy}, S_{xz}, S_{yz} — компоненты девиатора тензора истинных напряжений Эйлера; μ — модуль сдвига. Первые пять уравнений системы (1) представляют собой законы сохранения массы, импульса и энергии. Следующие шесть уравнений — физические соотношения упругости и пластичности с учетом поворота тензора напряжений в эйлеровых координатах (производная Яумана), записанные в дифференциальной форме.

Система (1) замыкается уравнением состояния (УРСом) в форме

$$\varepsilon = \varepsilon(p, \rho). \tag{2}$$

К системе (1), (2) добавляются начальные и краевые условия. В случае отсутствия сдвиговых напряжений система (1) переходит в уравнения Эйлера для движения сжимаемого газа [3]. Для описания процессов в плотных сжимаемых средах (металл) применяется баротропный УРС вида $p = p(\rho)$, позволяющий избежать интегрирования уравнения сохранения энергии. Для металлической пластины плотностью ρ_0 это будет УРС идеального упругопластического тела: $p = K\varepsilon_V$, где K — модуль объемного сжатия, $\varepsilon_V = 1 - \rho_0/\rho$ — объемная деформация. Критерием перехода из упругого напряженно-деформированного состояния в пластическое является условие текучести Мизеса: $J_2 = 1/2 S_{ij}S_{ij} \geq 1/3\sigma_{\text{т}}^2$, где J_2 — второй инвариант девиатора тензора напряжений; $\sigma_{\text{т}}$ — предел текучести. В соответствии с [14] в этом случае происходит коррекция компонент девиатора напряжений умножением на $\lambda = \sigma_{\text{т}}/\sqrt{3J_2}$. Для воздуха и газообразных продуктов взрыва (ПВ) $S_{xx} = S_{yy} = S_{zz} = S_{xy} = S_{xz} = S_{yz} = 0$; $\varepsilon = p/\rho(\gamma - 1)$. В силу близости термодинамических свойств воздуха и ПВ зависимость показателя адиабаты γ от ρ принимается единой для обеих сред в виде

$$\gamma(\rho) = \frac{R_1\rho_0/\rho A\exp(-R_1\rho_0/\rho) + R_2\rho_0/\rho B\exp(-R_2\rho_0/\rho) + C(1+\omega)(\rho/\rho_0)^{1+\omega}}{A\exp(-R_1\rho_0/\rho) + B\exp(-R_2\rho_0/\rho) + C(\rho/\rho_0)^{1+\omega}}, \tag{3}$$

полученном в предположении равенства скоростей звука для ПВ с использованием УРСа идеального газа и УРСа типа JWL [3]. Для ТГ50/50 константы из выражения (3) приведены в таблице.

Параметры ВВ

ВВ	ρ_0, г/см^3	D, км/с	p_H, ГПа	R_1	R_2	ω	A, ГПа	B, ГПа	C, ГПа
ТГ50/50	1,670	7,61	25,8	4,94	1,35	0,28	708,6	13,165	1,058

Интегральная форма системы (1), на базе которой строится разностная схема, имеет вид

$$\oiiint\limits_{\omega} \mathbf{u}dxdydz + \mathbf{f}dydzdt + \mathbf{g}dxdzdt + \mathbf{h}dxdydt = \iiiint\limits_{\Omega} \mathbf{k}dxdydzdt, \tag{4}$$

где Ω — любой замкнутый объем, поверхность ω которого — гомеоморфная сфера в четырехмерном пространстве (X, Y, Z, t).

На границах контакта ВВ и газа с пластиной ставится условие непроникания и отсутствия трения. В этом случае на контактной поверхности отсутствуют сдвиговые напряжения и полагаются равными нормальные компоненты скоростей взаимодействующих сред. В начальный момент времени все среды покоятся, напряжения и деформации отсутствуют, $p_0 = 0{,}1$ МПа.

Для моделирования процесса распространения детонации в заряде ВВ применяется гидродинамическая теория детонации [3]. Согласно этой модели ДВ является ударной волной, на фронте которой за счет химических реакций происходит мгновенное энерговыделение, поддерживающее процесс ее распространения в соответствии с принципом Гюйгенса (каждая точка ВВ, до которой доходит ДВ, становится источником детонации и независимо излучает сферическую ДВ). Скорость $D_{\text{ВВ}}$ распространения ДВ постоянна, и детонация от источника распространяется по лучам. Вызванное химическими реакциями энерговыделение задается путем увеличения энергии на $\Delta e = \rho_{BB}Q$ в тех точках ВВ, которые располагаются на фронте ДВ [3]. Здесь Q — калорийность ВВ.

Метод численного решения

Решение уравнений (1), (2), (4) производится методом Годунова повышенной точности [8—12], единым как для газодинамических, так и упругопластических течений, который модифицирован для решения задач динамики сжимаемых сред с необратимыми сдвиговыми деформациями на эйлерово-лагранжевых сетках. Данная модификация позволяет повысить порядок аппроксимации схемы до второго на гладких решениях, сохранив монотонность на разрывных, без изменения разностного шаблона явной двухшаговой схемы [7], модифицировав только шаг *предиктор*.

Модификация задачи распада разрыва в газах (воздух и ПВ). В классической схеме Годунова [7] для решения системы (1), (2), (4) применяется расщепление по пространственным переменным. Для каждой грани в нормальном направлении решается одномерная задача распада разрыва для давлений, плотностей и скоростей, определенных в центрах соседних ячеек. В модифицированной схеме [8—10], позволяющей проводить расчеты с повышенной точностью, эта одномерная задача решается при предварительно интерполированных параметрах. Параметры интерполируются из центров рассматриваемой и соседней с ней ячеек на границы области влияния течения для грани рассматриваемой ячейки на момент времени $\Delta t/2$, где Δt — временной шаг интегрирования (рис. 2). Фактически сближаются области влияния дифференциальной и разностной задач. Интерполируются давления, плотности, скорости. Предполагается линейное распределение параметров течения между центрами ячеек, т. е. отсутствие разрыва на общей грани ячеек.

В декартовых координатах для ячейки с центром в точке (x_i, y_j, z_k) и гранями по оси OX $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$, $(x_{i+1/2}, y_j, z_k)^*$ для временного слоя t^n это будет следующее распределение параметров течения в виде векторной функции $U(p, \rho, u, v, w)$ вдоль оси OX:

$$U(x, y_j, z_k) = \begin{cases} U(x_{i-1}, y_j, z_k) + \dfrac{U(x_i, y_j, z_k) - U(x_{i-1}, y_j, z_k)}{x_i - x_{i-1}}(x - x_{i-1}) & \text{при} \quad x_{i-1} \le x \le x_i; \\ U(x_i, y_j, z_k) + \dfrac{U(x_{i+1}, y_j, z_k) - U(x_i, y_j, z_k)}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) & \text{при} \quad x_i \le x \le x_{i+1}. \end{cases}$$

Шаг сетки вдоль оси OX $h_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$. Для направлений Y, Z — аналогично.

Задача распада разрыва для ячейки с центром в точке (x_i, y_j, z_k) решается для грани $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$ между параметрами $U(x_{i-1}^+, y_j, z_k)$ и $U(x_i^-, y_j, z_k)$ и грани $(x_{i+1/2}, y_j, z_k)$ между параметрами $U(x_i^+, y_j, z_k)$ и $U(x_{i+1}^-, y_j, z_k)$. Координаты точек (x_{i-1}^+, y_j, z_k), (x_i^-, y_j, z_k) и (x_i^+, y_j, z_k), (x_{i+1}^-, y_j, z_k) варьируются. Для других граней аналогично. Первое дифференциальное приближение линеаризованной системы (1), (2) в зависимости от координат варьируемых точек позволяет осуществить выбор этих точек [10], обеспечивающий второй порядок аппроксимации в области гладких решений и монотонность на разрывных решениях.

В случае уравнений Эйлера координаты этих точек имеют очевидный физический смысл. Они ограничивают область влияния на решение задачи распада разрыва для грани интегрируемой ячейки на момент $\Delta t/2$. То есть на момент $\Delta t/2$, когда определяются потоки через соответствующую грань из решения задачи распада разрыва, возмущения могут быть только из области, ограниченной крайними характеристиками, приходящими на эту грань. Размер области влияния для всех случаев составляет $c_0\Delta t$ и совпадает с областью влияния дифференциальной задачи. На рис. 3 приведена

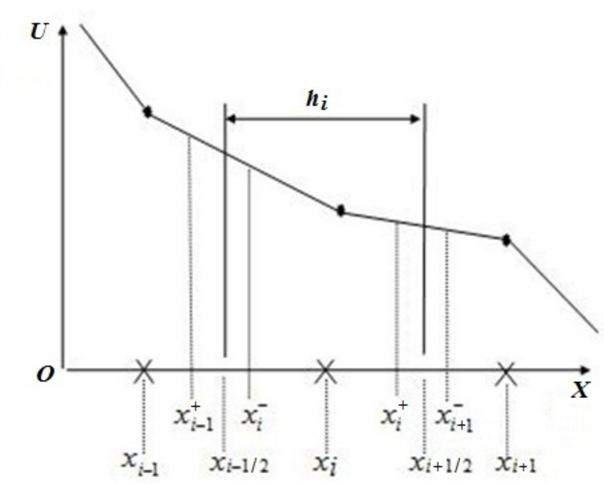

Рис. 2. Линейное распределение параметров между центрами ячеек

*Здесь и далее параметры с целыми нижними индексами будут указывать значения в центрах ячеек на нижнем временном слое; полуцелые индексы будут относиться к граням ячеек и *распадным* (на промежуточном слое) значениям параметров на этих гранях.

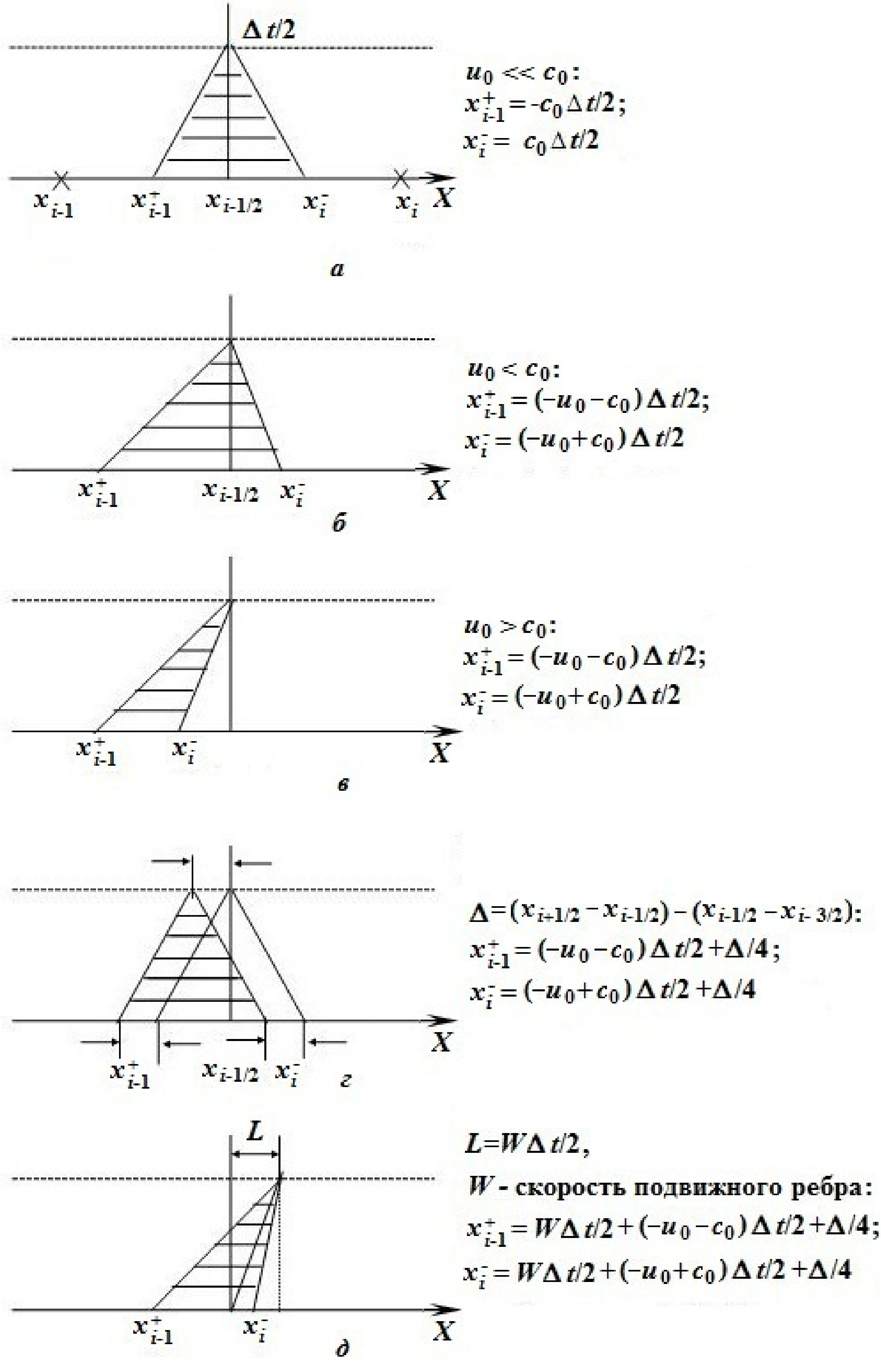

Рис. 3. Области влияния на решение задачи распада разрыва для грани интегрируемой ячейки на момент $\Delta t/2$ в частных случаях: *а* — акустика; *б* — дозвуковое течение; *в* — сверхзвуковое течение; *г* — неравномерная сетка, сдвиг к большей ячейке; *д* — подвижная неравномерная сетка

геометрическая интерпретация поведения характеристик для грани ячейки с координатой $x = x_{i-1/2}$ (частные случаи):

- акустический случай (см. рис. 3, *а*): область влияния $c_0\Delta t = x_i^- - x_{i-1}^+ = x_{i+1}^- - x_i^+$ и соответственно точки интерполяции симметричны относительно грани;
- дозвуковой случай (см. рис. 3, *б*): смещение $c_0\Delta t$ вверх по потоку;
- сверхзвуковой случай (см. рис. 3, *в*): смещение $c_0\Delta t$ вверх по потоку на одну ячейку;
- неравномерная сетка (см. рис. 3, *г*): смещение $c_0\Delta t$ в сторону большей ячейки;
- подвижное ребро (см. рис. 3, *д*): точки интерполяции и область влияния $c_0\Delta t$ определяются относительно положения грани в момент $\Delta t/2$.

В схеме первого порядка область влияния не зависит от времени и определяется размером ячейки $h_i \geq c_0\Delta t$.

Построенная таким образом схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству на эйлеровых и эйлерово-лагранжевых сетках на гладких решениях и монотонна на разрывных. Сохраняя достоинства классической схемы, она не требует увеличения разностного шаблона при практически тех же вычислительных затратах. Таким образом, по сравнению с классической схемой [7] в области гладких решений модифицированная схема имеет второй порядок аппроксимации при соответствующем выборе координат точек интерполяции в предположении линейного изменения параметров между центрами ячеек. Этот же принцип (решение задачи распада разрыва на момент времени $\Delta t/2$) используется для повышении точности при реализации различного типа граничных условий. Этап *корректор* численного интегрирования уравнений (4) остается неизменным и совпадает с классической схемой [7].

Модификация задачи распада разрыва в деформируемом твердом теле. В работе [14] В. Н. Кукуджановым было показано, что для численного моделирования динамических упругопластических уравнений со вторым порядком аппроксимации для схем типа *предиктор—корректор* на этапе *предиктор* достаточно решения уравнений упругости со вторым порядком аппроксимации с использованием линеаризованных уравнений (1), (2). При этом учет пластического поведения среды происходит на этапе *корректор* после интегрирования линеаризованных уравнений и сводится к "посадке" девиаторов на поверхность текучести [14]. В соответствии с этим решение задачи распада разрыва проводится на основе упрощенной системы уравнений в упругом приближении, получаемой из (1), если положить $\lambda = 0$. Исходную систему (1), (2) линеаризуем в окрестности некоторого состояния и предполагаем, что движение происходит вдоль оси OX и все неизвестные функции зависят только от x. Получим систему из одиннадцати уравнений. После введения автомодельной переменной $\xi = x/t$ система преобразуется к системе обыкновенных дифференциальных уравнений [15]. Нетривиальные решения этой системы:

$$\xi_1 = u + a; \quad \xi_2 = u - a; \quad \xi_3 = u + \beta_y; \quad \xi_4 = u - \beta_y; \quad \xi_5 = u + \beta_z;$$
$$\xi_6 = u - \beta_z; \quad \xi_7 = u; \quad \xi_8 = u; \quad \xi_9 = u; \quad \xi_{10} = u, \quad \xi_{11} = u.$$

Здесь

$$a^2 = c^2 + \frac{4/3\mu - fS_{xx}}{\rho}, \quad c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s, \quad f = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p}\right)_\rho;$$

$$\beta_y = \sqrt{\frac{\mu + 3/4S_{xx}}{\rho} - 0{,}5\sqrt{\frac{0{,}25\,(S_{yy} - S_{zz})^2 + S_{yz}^2}{\rho^2}}};$$

$$\beta_z = \sqrt{\frac{\mu + 3/4S_{xx}}{\rho} + 0{,}5\sqrt{\frac{0{,}25\,(S_{yy} - S_{zz})^2 + S_{yz}^2}{\rho^2}}}.$$

Решения представляют собой скорости разрывов, образующих устойчивую конфигурацию (рис. 4).

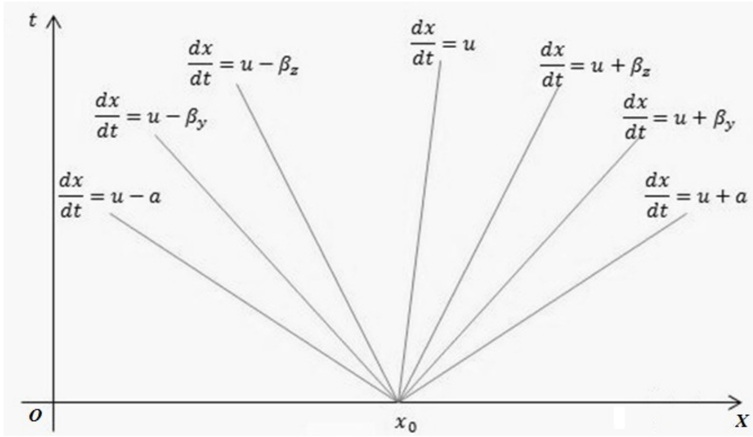

Рис. 4. Конфигурация разрывов для упругого распада разрыва

В плоскости (X,t) траектории разрывов (характеристики) изображаются лучами, исходящими из точки $x = x_0$, и делят полуплоскость $t > 0$ на восемь зон.

Соотношения на этих характеристиках для инвариантов Римана R_l, $l = \overline{1,11}$, имеют следующий вид:

$$R_1 = [\rho a]\, u - \left[a(1+f)\frac{S_{xy}(a^2-b_3^2) - 0{,}5 S_{xz}S_{yz}/\rho}{(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2/\rho^2}\right] v - \left[a(1+f)\frac{S_{xz}(a^2-b_2^2) - 0{,}5 S_{xy}S_{yz}/\rho}{(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2/\rho^2}\right] w +$$
$$+ p - S_{xx} + \left[(1+f)\frac{\rho S_{xy}(a^2-b_3^2) - 0{,}5 S_{xz}S_{yz}}{\rho^2(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xy} + \left[(1+f)\frac{\rho S_{xz}(a^2-b_2^2) - 0{,}5 S_{xy}S_{yz}}{\rho^2(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xz},$$
$$b_2^2 = \left(\mu + 0{,}5(S_{xx} - S_{yy})\right)/\rho, \quad b_3^2 = \left(\mu + 0{,}5(S_{xx} - S_{zz})\right)/\rho;$$
$$R_2 = [-\rho a]\, u + \left[\rho a(1+f)\frac{\rho S_{xy}(a^2-b_3^2) - 0{,}5 S_{xz}S_{yz}}{\rho^2(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] v + \left[\rho a(1+f)\frac{\rho S_{xz}(a^2-b_2^2) - 0{,}5 S_{xy}S_{yz}}{\rho^2(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] w +$$
$$+ p - S_{xx} + \left[(1+f)\frac{\rho S_{xy}(a^2-b_3^2) - 0{,}5 S_{xz}S_{yz}}{\rho^2(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xy} + \left[(1+f)\frac{\rho S_{xz}(a^2-b_2^2) - 0{,}5 S_{xy}S_{yz}}{\rho^2(a^2-b_2^2)(a^2-b_3^2) - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xz};$$
$$R_3 = [\beta_y \rho]\, v - [\beta_y \rho C]\, w - S_{xy} + [C]\, S_{xz}; \quad R_4 = -[\beta_y \rho]\, v + [\beta_y \rho C]\, w - S_{xy} + [C]\, S_{xz};$$
$$R_5 = [\beta_z \rho C]\, v - [\beta_z \rho]\, w - [C]\, S_{xy} + S_{xz}, \quad C = \sqrt{1 - 2 \Bigg/ \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4S_{yz}^2}{(S_{yy} - S_{zz})^2}}\right)}, \quad 0 \le C \le 1;$$
$$R_6 = -[\beta_z \rho C]\, v + [\beta_z \rho]\, w - [C]\, S_{xy} + S_{xz};$$
$$R_7 = \left[a^2\right] \rho - p + S_{xx} + \left[\frac{(1+f)(S_{xy}\rho b_3^2 + 0{,}5 S_{xz}S_{yz})}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yx}^2}\right] S_{xy} + \left[\frac{(1+f)(\rho b_2^2 S_{xz} + 0{,}5 S_{xy}S_{yz})}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xz};$$
$$R_8 = \left[\frac{4}{3}\frac{\mu}{\rho}\right] \rho + S_{xx} + \left[\frac{S_{xy}\rho b_3^2 + 0{,}5 S_{xz}S_{yz}}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xy} + \left[\frac{\rho b_2^2 S_{xz} + 0{,}5 S_{xy}S_{yz}}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xz};$$
$$R_9 = \left[-\frac{2}{3}\frac{\mu}{\rho}\right] \rho + S_{yy} + \left[\frac{-S_{xy}\rho b_3^2}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xy} + \left[\frac{-0{,}5 S_{xy}S_{yz}}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xz};$$
$$R_{10} = \left[-\frac{2}{3}\frac{\mu}{\rho}\right] \rho + S_{zz} + \left[\frac{-0{,}5 S_{xz}S_{yz}}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xy} + \left[\frac{-\rho b_2^2 S_{xz}}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xz};$$
$$R_{11} = \left[\frac{-0{,}5 S_{xz}\rho b_3^2 - 0{,}25 S_{xy}S_{yz}}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xy} + \left[\frac{-0{,}5 \rho b_2^2 S_{xy} - 0{,}25 S_{xz}S_{yz}}{\rho b_2^2 \rho b_3^2 - 0{,}25 S_{yz}^2}\right] S_{xz} + S_{yz}.$$

Здесь величины в квадратных скобках представляют собой коэффициенты линеаризации, определяемые по усредненным параметрам в ячейках. В отличие от уравнений газовой динамики в данном случае для получения схемы второго порядка аппроксимации из центров ячеек линейно интерполируются сами инварианты Римана [11, 12]. Координаты точек интерполяции определяются как координаты точек, из которых приходят соответствующие инварианты на грань в момент времени $\Delta t/2$, где w — скорость грани (обозначена пунктиром на рис. 5), следующим образом:

$$x_n = \frac{(x_{i-1} + x_i)}{2} - \frac{(c_n - w)\Delta t}{2}, \quad n = 1, \dots, 11,$$

где

$$c_1 = u + a; \quad c_2 = u - a; \quad c_3 = u + \beta_y; \quad c_4 = u - \beta_y; \quad c_5 = u + \beta_z;$$
$$c_6 = u - \beta_z; \quad c_7 = c_8 = c_9 = c_{10} = c_{11} = u.$$

Обозначив интерполированные инварианты индексом m, получим

$$R_n^m = R_n^{i-1} + \frac{\left(R_n^i - R_n^{i-1}\right)(x_n - x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})}, \quad n = 1, \dots, 11.$$

Полученные значения инвариантов используются для определения *распадных* и *потоковых* значений, в зависимости от того, в какую зону попадает грань ячейки (рис. 5). Этап численного интегрирования уравнений (этап *корректор*) остается неизменным [7].

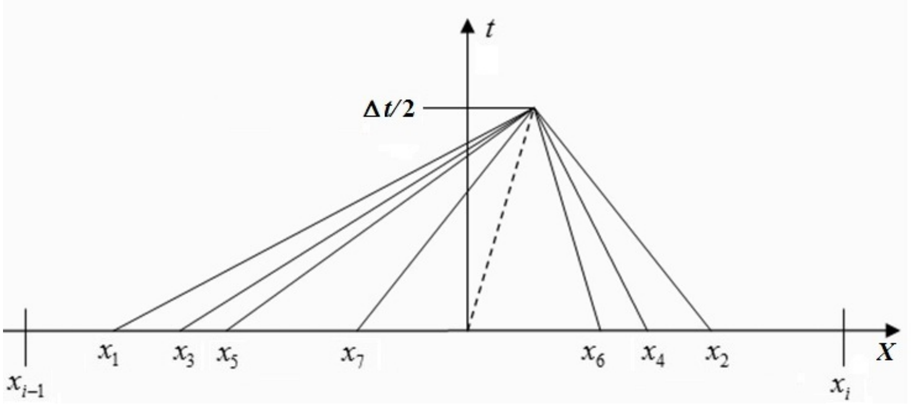

Рис. 5. Координаты приходящих инвариантов для грани интегрируемой ячейки на момент $\Delta t/2$

Монотонность на разрывных решениях. Решение по схеме второго порядка будет испытывать дисперсионные колебания на разрывах. Чтобы обеспечить монотонность, необходимо строить решение следующим образом: в областях гладкости — по соотношениям, обеспечивающим второй порядок аппроксимации, а на разрывах — по соотношениям схемы первого порядка. Критерии оценки области перехода для газов изложены в работах [8—10]. Для упругопластических течений, в отличие от задач газовой динамики, где необходимо анализировать поля давлений и плотностей, для получения монотонных решений достаточно анализа поля нормальных напряжений [11, 12]. Критерии перехода основаны на анализе квадратичных сплайнов. Например, при расчете задачи распада разрыва на ребре $x_{i-1/2}$ строится левый квадратичный сплайн по давлениям p_{i-2}, p_{i-1}, p_i и правый — по давлениям p_{i-1}, p_i, p_{i+1}. Несмотря на то, что численная функция монотонна, сплайны могут быть как монотонными, так и иметь экстремумы. В случае монотонных сплайнов применяется схема второго порядка. Если левый сплайн имеет максимум между центрами ячеек с координатами x_{i-2} и x_i или правый сплайн имеет максимум между центрами ячеек с координатами x_{i-1} и x_{i+1}, то для решения задачи распада разрыва берутся параметры из центров ячеек и определяется решение этой задачи, как в классической схеме Годунова. Можно ослабить этот критерий и брать параметры из центров только слева или справа, анализируя положение соответствующего экстремума. При этом можно добиться размазывания на разрыве на 2—3 ячейки.

Контакт на границе *газ — деформируемое тело.* Контактные условия между газом и упругопластической средой реализуются на этапе *предиктор* схемы Годунова, т. е. на этапе решения задачи распада разрыва. Со стороны деформируемого тела используются восемь инвариантов, приходящих на границу, и три граничных условия. Со стороны газа используются три соотношения на нелинейных волнах сжатия и разряжения. Для повышения точности в области гладких решений используется экстраполяция параметров из граничной и предграничной ячеек.

Разработан итерационный алгоритм получения совместного решения, который в общем случае выглядит следующим образом [16]:

1. Для параметров газа реализуются граничные условия типа *подвижная жесткая стенка* [7], нормальная скорость которой равна скорости в примыкающей ячейке деформируемого тела. В результате получаем давление на границе *газ — деформируемое тело.*
2. Для параметров граничной ячейки деформируемого тела реализуются граничные условия с заданным нормальным напряжением, которое равно давлению, полученному на шаге 1, с противоположным знаком и нулевыми касательными напряжениями.
3. Определенная на шаге 2 новая нормальная скорость на границе циклически используется на шаге 1 как нормальная скорость жесткой стенки. Процесс продолжается до сходимости по этой нормальной скорости. Как правило, достаточно 3—4 итераций до сходимости с относительной точностью 0,001.

Многосеточный алгоритм для расчета контактных задач

Эйлерово-лагранжевы подходы, описывающие взаимодействие сред и конструкций, основанные на использовании подвижных криволинейных сеток, отслеживающих движение лагранжевых контактных границ, с соответствующими перестройками эйлеровых сеток внутри однородной области широко используются в решении двумерных задач [17, 18]. Однако они оказались практически непригодными для решения трехмерных задач этого класса. Причиной является сложность построения трехмерных подвижных эйлерово-лагранжевых сеток, связанных с деформируемыми контактными лагранжевыми поверхностями. Кроме того, большое влияние на точность решения оказывает точность вычисления интегралов по подвижным пространственно-временным ячейкам, особенно для деформируемых твердых тел. Поэтому в данной работе используется эйлерово-лагранжев подход на сетках типа *химера* [19, 20].

Подход является многосеточным и использует три типа расчетных сеток [21]: 1) лагранжевы сетки в виде STL-файлов, задающие и сопровождающие деформируемые поверхности тел; 2) неподвижные регулярные эйлеровы сетки с кубическими ячейками, используемые внутри однородных областей; 3) вспомогательные локальные подвижные эйлерово-лагранжевы сетки, связанные с поверхностями тел.

В целом, алгоритм расчета контактного взаимодействия сред и конструкций состоит из следующих этапов:

1. Конструкции и среды задаются поверхностями из наборов треугольников с необходимой точностью в виде файлов STL-формата, содержащих внешние нормали и координаты вершин треугольников. На рис. 6 приведен случай контакта двух объектов, отмеченных красным и синим цветами.
2. Каждая расчетная область (газ, твердое тело) с криволинейными границами заключается в окаймляющий прямоугольный параллелепипед и покрывается декартовой сеткой. На рис. 7, *а* приведено сечение такой расчетной области (черная сплошная кривая) с окаймляющим параллелепипедом. Получаем четыре вида ячеек: 1) секущиеся треугольниками поверхности граничные ячейки (окрашены зеленым); 2) снаружи поверхности; 3) внутри поверхности, для интегрирования которых хватает разностного шаблона из целых ячеек, находящихся внутри

поверхности (светло-коричневого цвета); 4) внутри поверхности, для интегрирования которых не хватает указанного шаблона (отмечены черными точками).

3. На каждом треугольнике поверхности строится вспомогательная локальная декартова сетка с размерами $3 \times 3 \times 3$ внутрь объема по нормали от этой поверхности (на рис. 6 это сетки светло-коричневого цвета). Размеры ячеек этой локальной трехмерной сетки берутся близкими к размерам ячеек внутренней сетки. В случае контакта с другой подобластью или граничных условий, требующих дополнительных параметров, локальная сетка симметрично достраивается и в эту подобласть от плоскости треугольника (на рис. 6 отмечена зеленым цветом). На рис. 8, *а* показана вспомогательная сетка для одного треугольника. На рис. 8, *б* приведены треугольник и примыкающие к нему центральные ячейки вспомогательной сетки; центры граней этих ячеек совпадают с центром треугольника. Значения параметров в построенной локальной сетке определяются интерполяцией параметров с предыдущей локальной и основной сеток.

   Данного шаблона достаточно для интегрирования центральных ячеек, примыкающих к лагранжевой контактной поверхности (на рис. 8, *а* они выделены темным цветом, а на рис. 9 приведены отдельно и помечены крестиками), с повышенной точностью по модифицированной схеме С. К. Годунова. Для центральных ячеек (см. рис. 8, *б*) решается задача распада

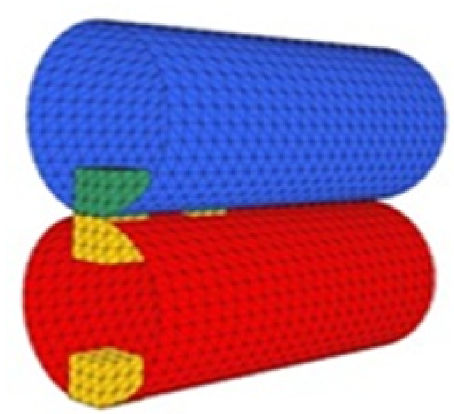

Рис. 6. Поверхности объектов и вспомогательные локальные сетки для каждого треугольника поверхности

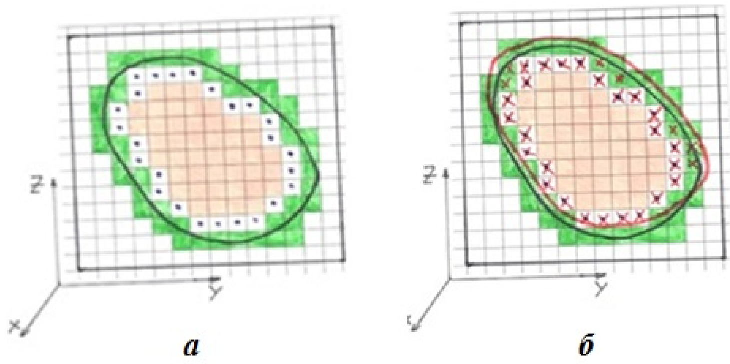

Рис. 7. Сечение поверхности и виды ячеек до (*а*) и после (*б*) ее передвижения

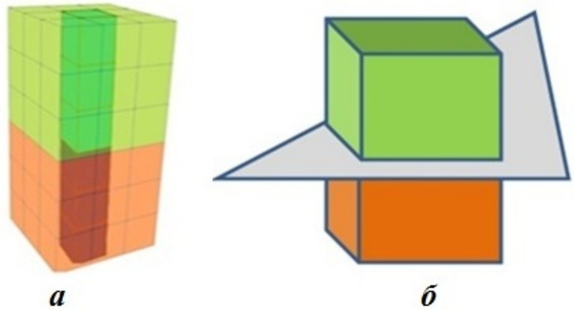

Рис. 8. Вспомогательная локальная сетка в случае контакта (*а*) и ее центральные ячейки, примыкающие к треугольнику контактной поверхности (*б*)

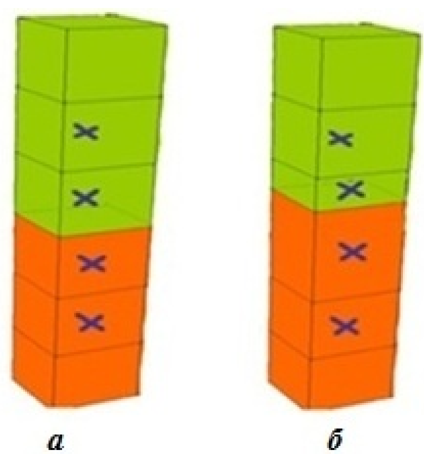

Рис. 9. Центральные ячейки локальной сетки до (*а*) и после (*б*) передвижения контактной поверхности и интегрирования

разрыва на контактных границах сред. Результатом ее решения являются скорости и силы на половинном временном слое в центре соответствующего треугольника.

С нормальной скоростью двигаем контактную границу и получаем локальную сетку на новом временном слое. На рис. 9 приведены центральные ячейки до и после передвижения контактной границы. Проводим стандартное интегрирование параметров этих центральных ячеек подвижных сеток. Так как движение локальной сетки одномерное, объемные и поверхностные интегралы по ячейкам при этом считаются точно.

4. Используя скорости в центре каждого треугольника, полученные из решения задачи распада разрыва на этапе 3, вычисляем скорости в вершинах треугольников STL-файла с весами, пропорциональными площадям треугольников. С этими скоростями двигаем вершины и получаем положение поверхности на новом временном слое (новый STL-файл).
5. Производим перестройку окаймляющего параллелепипеда с возможным добавлением или уменьшением слоев ячеек в соответствии с новым положением поверхности (красная кривая на рис. 7, *б*). К ячейкам четвертого вида (см. этап 2), оставшимся в расчетной области на новом временном слое (отмечены крестиками на белом фоне), добавляем непроинтегрированные ячейки, захваченные при передвижении поверхности (отмечены крестиками на зеленом фоне).
6. В ячейки четвертого вида (на рис. 7, *б* отмечены крестиками на белом и зеленом фоне) интерполируем параметры из проинтегрированных ячеек третьего вида и проинтегрированных ячеек локальных сеток, таким образом завершив расчетный шаг.

Алгоритм распространения установившейся детонации

Согласно используемой математической модели распространения ДВ в численной реализации процесса применялся следующий алгоритм [16, 22]. Все ячейки, располагающиеся в области, занимаемой ВВ, разделяются на продетонировавшие и непродетонировавшие. На каждом шаге по времени для каждой непродетонировавшей (интегрируемой) ячейки шестигранной кубической сетки анализируется окрестность из соседних 26 ячеек (для краткости *соседей*).

Если сосед принадлежит области ВВ и уже продетонировал, то определяется время прихода ДВ из центра инициирования для соседа в центр интегрируемой ячейки по прямой линии (лучу). Если такой луч провести нельзя (например, для невыпуклых областей), то соседняя продетонировавшая ячейка сама становится источником и момент детонации интегрируемой ячейки рассчитывается как момент детонации соседа плюс время, необходимое для прихода ДВ из центра соседа в ее центр.

После анализа всех соседей выбирается наименьшее время, которое и является моментом детонации интегрируемой ячейки. Если физическое время процесса превышает данный момент, то ячейка считается продетонировавшей и к энергии в этой ячейке добавляется энерговыделение ВВ. Иначе ячейка остается непродетонировавшей и добавление энергии на этом шаге не производится.

Ограничения на шаг интегрирования изложенной методики аналогичны ограничениям явной схемы Годунова для многомерных задач [7]. Ограничения на шаг по времени для данной модификации схемы Годунова второго порядка аппроксимации менее жесткие, чем для схемы первого порядка. Расчетный шаг выбирается минимальным из допустимых шагов по всем ячейкам для всех типов сеток.

Разработанная методика основана на явных численных схемах типа Годунова повышенной точности, программно реализована на языке Фортран и распараллелена по технологии OpenMP. Использование неподвижных регулярных эйлеровых сеток и STL-файлов для описания движения лагранжевых контактных и граничных поверхностей в рамках данного многосеточного подхода позволяет избежать трудоемких и снижающих точность процедур пошагового перестроения расчетных сеток по расчетным областям с подвижными границами. Использование стандартных STL-файлов при задании границ расчетных областей и для построения всех типов сеток позволяет сильно упростить подготовку начальных данных как для решения сложных задач, так и для выделения и сопровождения контактных границ в процессе решения.

Результаты численного исследования взаимодействия газокумулятивных зарядов с упругопластической преградой

Постановка трехмерной задачи показана на рис. 1, *а*. На рис. 1, *б* показаны расчетные области и сетки в сечении $Y = 0$. Красным цветом выделен П-образный заряд ВВ, белым — воздух, синим — металлическая преграда. В процессе расчета контактные поверхности между ПВ и воздухом не выделяются. На внешних границах воздуха реализуются условия *свободного вытока* [7]. На внешних границах металлической преграды выполняются условия, как на *свободной границе* с заданным давлением $p = 0{,}1$ МПа. Решается трехмерная задача взаимодействия двух подобластей — газа и деформируемой пластины — на неподвижных эйлеровых сетках с выделением подвижной лагранжевой контактной поверхности. В начальный момент времени все среды предполагаются невозмущенными, кроме заряда, в котором верхний слой ячеек считается продетонировавшим. Размеры заряда: длина по оси OX равна 8 см, по оси OY — 4 см, по оси OZ — 4 см. Размеры полости: длина по оси OX равна 4 см, по оси OY — 4 см, по оси OZ — 2 см [1]. Параметры пластины: длина по оси OX — 12 см, по оси OY — 12 см, толщина по оси OZ — 3 см; материал — сталь-20 со следующими механическими характеристиками: плотность $\rho = 7{,}8$ г/см^3; модуль объемной деформации $K = 1{,}67 \cdot 10^5$ МПа; модуль сдвига $\mu = 7{,}69 \cdot 10^4$ МПа; предел текучести $\sigma_{\text{т}} = 250$ МПа.

Данная задача также рассчитывалась авторами по модифицированной схеме Годунова в двумерной плоской постановке по эйлерово-лагранжевой методике с совмещением контактных границ с линиями лагранжевых разностных сеток (см. [16]). С учетом анализа на сходимость решения, полученного в работе [16], размеры ячеек по газу брались 0,05 см, по преграде — 0,1 см, что потребовало ~ 6 млн ячеек в целом. Расчеты производились до момента времени 140 мкс, когда в преграде уже сформирована остаточная каверна, а сама преграда двигается по инерции как жесткое тело.

Результаты трехмерного численного моделирования по изложенной методике показывают, что процессы распространения детонации и формирования кумулятивной струи в полости заряда качественно аналогичны рассмотренным ранее двумерным решениям [16]. На рис. 10 приведены распределения давления в газе на плоскости симметрии заряда $Y = 0$ в три момента времени: $t = 4{,}9$ мкс соответствует окончанию детонации заряда и формированию отраженной от преграды ударной волны, $t = 8$ мкс — максимальным давлениям при воздействии сформировавшейся кумулятивной струи на преграду, $t = 12{,}2$ мкс — прекращению действия кумулятивного потока на преграду и интенсивному разлету ПВ в окружающее пространство. Поля плотностей и вертикальных скоростей в газе, показанные на рис. 11, 12, подтверждают характер происходящих процессов в эти моменты времени. В формирующейся кумулятивной струе газ разгоняется до скоростей выше 10 км/с. Разработанный алгоритм распространения детонации обеспечивает сходимость численного решения за фронтом ДВ и при выбранной дискретизации дает значения в ячейках на фронте волны 23,5 ГПа (точное значение 25,8 ГПа).

На рис. 13 приведены зависимости от времени давления, скорости и перемещения в некоторых лицевых точках преграды. Красным цветом обозначены зависимости в центре преграды на пересечении плоскостей симметрии, зеленым цветом — в точке под "ножкой" П-образного заряда, синим цветом — в угловой точке преграды. Максимальные давления на преграду возникают под ножками заряда (42 ГПа) и превышают давление Чепмена—Жуге на фронте ДВ (25,8 ГПа). К моменту времени 25 мкс заканчивается передача энергии от ПВ к преграде, давление на преграду становится малым и пластина продолжает деформироваться фактически инерционно, совершая колебания под действием упругих волн и их отражений от границ пластины. На момент $t = 140$ мкс разница вертикальных скоростей в различных точках пластины не превышает 40 м/с.

На рис. 14 приведены формы преграды, близкие к остаточным, и распределения вертикальной скорости на поверхности плиты при $t = 140$ мкс.

Максимальная глубина каверны составляет 1,28 см, что близко к эксперименту [1], где максимальная глубина составила 1,3 см. Отметим, что решение данной задачи в двумерной плоской постановке дало 1,6 см [16].

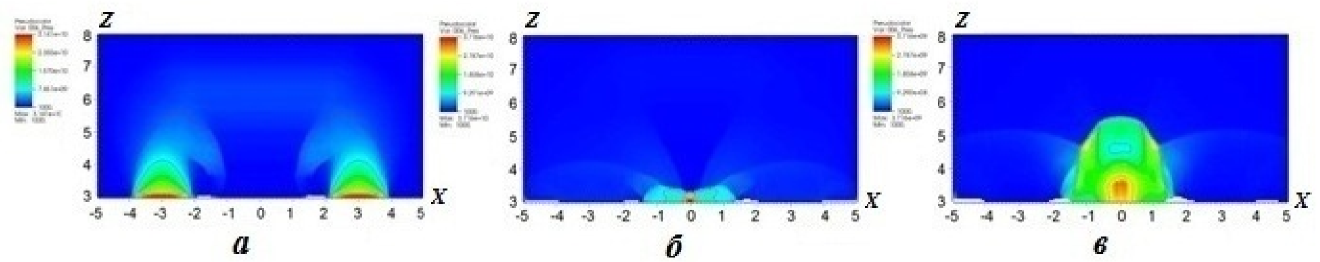

Рис. 10. Поля давлений (в Па) в газе в сечении $Y = 0$: *а* — $t = 4{,}9$ мкс; *б* — $t = 8$ мкс; *в* — $t = 12,2$ мкс

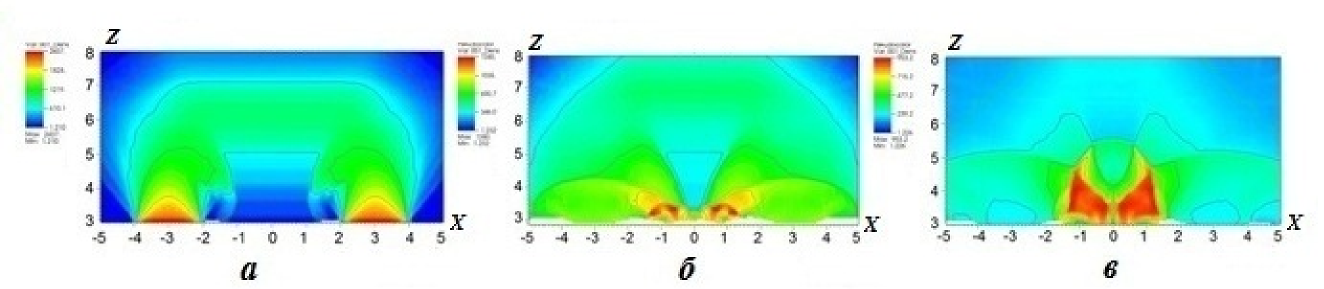

Рис. 11. Поля плотностей (в кг/м^3) в газе в сечении $Y = 0$: *а* — $t = 4{,}9$ мкс; *б* — $t = 8$ мкс; *в* — $t = 12,2$ мкс

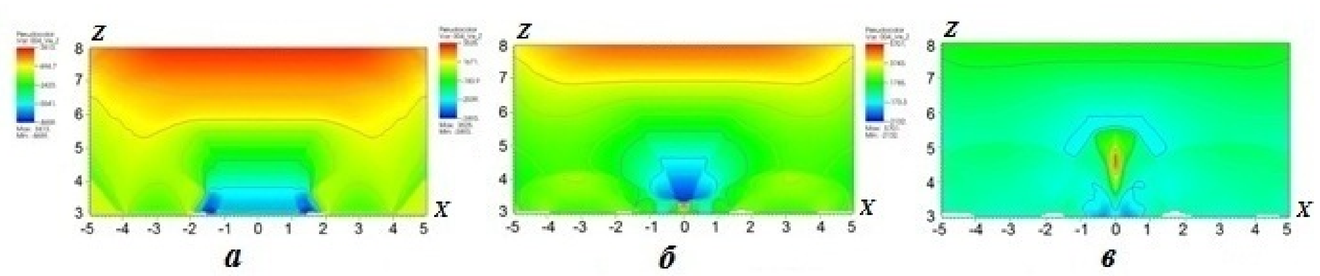

Рис. 12. Поля вертикальных скоростей (в м/с) в газе в сечении $Y = 0$: *а* — $t = 4{,}9$ мкс; *б* — $t = 8$ мкс; *в* — $t = 12,2$ мкс

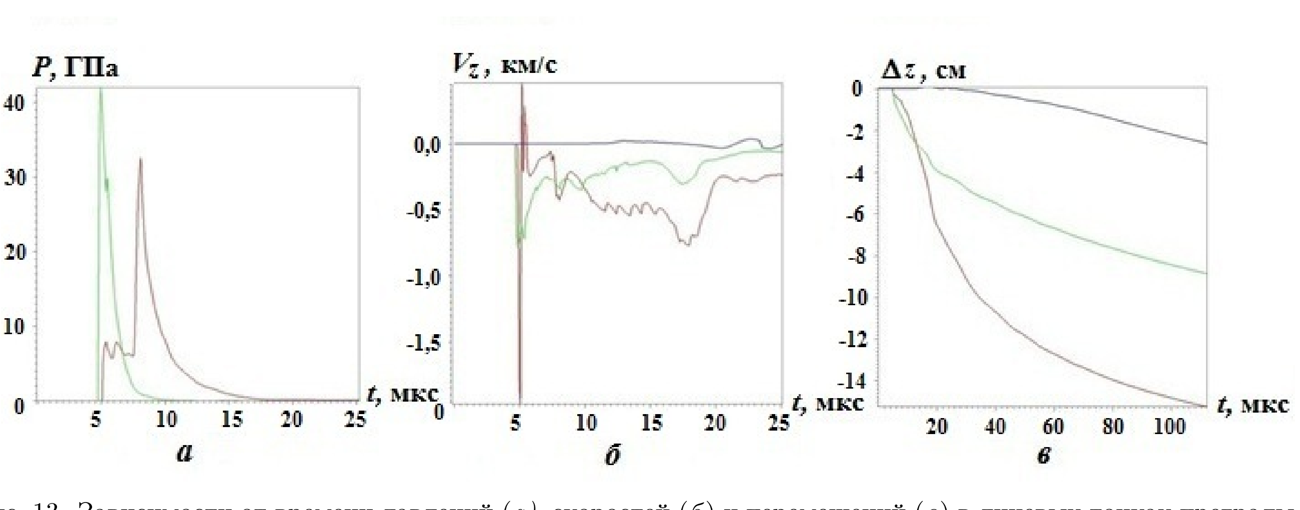

Рис. 13. Зависимости от времени давлений (*а*), скоростей (*б*) и перемещений (*в*) в лицевых точках преграды

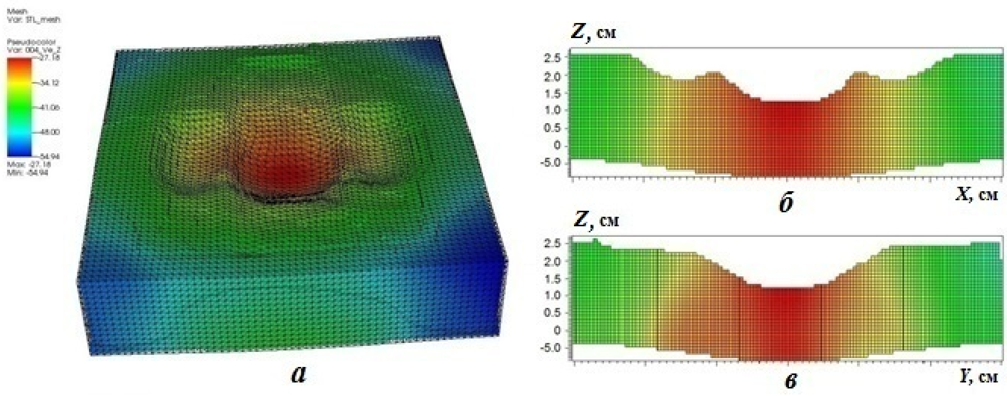

Рис. 14. Вид каверны в преграде при t=140 мкс: *а* — 3D изображение; *б* — сечение $Y = 0$; *в* — сечение $X = 0$; цветом показаны распределения вертикальной скорости

Заключение

Разработанная и описанная в статье численная методика решения трехмерных задач взаимодействия высокоскоростных газовых струй с упругопластическими преградами позволяет получать достоверные результаты с высокой точностью, хорошо согласующиеся с известными экспериментальными данными. Изложенная методика обладает заметными преимуществами при решении нелинейных задач с большими перемещениями и деформациями. Использование STL-файлов для построения всех типов сеток и описания движения лагранжевых контактных и граничных поверхностей в рамках данного многосеточного подхода, а также применение регулярных неподвижных эйлеровых сеток позволяют резко упростить подготовку начальных данных для решения сложных задач и повысить эффективность и точность расчетов за счет исключения искажений и перестроений расчетных сеток в традиционных эйлерово-лагранжевых методиках.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-08-00320).

Список литературы

1. *Батьков Ю. В., Ковтун А. Д., Новиков С. А., Скоков В. И., Толстикова Л. А.* О механизме формирования газовой высокоскоростной струи // ФГВ. 2001. Т. 37, № 5. С. 98—103.
Batkov Yu. V., Kovtun A. D., Novikov S. A., Skokov V. I., Tolstikova L. A. O mekhanizme formirovaniya gazovoy vysokoskorostnoy strui // FGV. 2001. T. 37, № 5. S. 98—103.

2. *Мержиевский Л. А., Титов В. М., Фадеенко Ю. И., Швецов Г. А.* Высокоскоростное метание твердых тел // Там же. 1987. Т. 23, № 5. С. 77—91.
Merzhievskiy L. A., Titov V. M., Fadeenko Yu. I., Shvetsov G. A. Vysokoskorostnoe metanie tverdykh tel // Tam zhe. 1987. T. 23, № 5. S. 77—91.

3. Физика взрыва: в 2 т. / Под ред. Л. П. Орленко. Изд. 3-е, испр. Т. 2. М.: Физматлит, 2004.
Fizika vzryva: v 2 T. / Pod red. L. P. Orlenko. Izd. 3-e, ispr. T. 2. M.: Fizmatlit, 2004.

4. *Федоров С. В., Баянова Я. М., Ладов С. В.* Численный анализ влияния геометрических параметров комбинированной кумулятивной облицовки на массу и скорость формируемых взрывом компактных элементов // ФГВ. 2015. Т. 51, № 1. С. 150—164.
Fedorov S. V., Bayanova Ya. M., Ladov S. V. Chislenny analiz vliyaniya geometricheskikh parametrov kombinirovannoy kumulyativnoy oblitsovki na massu i skorost formiruemykh vzryvom kompaktnykh elementov // FGV. 2015. T. 51, № 1. S. 150—164.

5. *Абузяров К. М., Абузяров М. Х., Глазова Е. Г., Кочетков А. В., Крылов С. В., Маслов Е. Е., Романов В. И.* Численное моделирование трехмерных процессов разгона упругопластических тел взрывом // Проблемы прочности и пластичности. 2018. Вып. 80, № 2. С. 255—266.
Abuzyarov K. M., Abuzyarov M. Kh., Glazova E. G., Kochetkov A. V., Krylov S. V., Maslov E. E.,

Romanov V. I. Chislennoe modelirovanie trekhmernykh protsessov razgona uprugoplasticheskikh tel vzryvom // Problemy prochnosti i plastichnosti. 2018. Vyp. 80, № 2. S. 255—266.

6. *Федоров С. В.* Численное моделирование формирования кумулятивных струй полусферическими облицовками дегрессивной толщины // ФГВ. 2016. Т. 52, № 5. С. 116—130.
Fedorov S. V. Chislennoe modelirovanie formirovaniya kumulyativnykh struy polusfericheskimi oblitsovkami degressivnoy tolshchiny // FGV. 2016. T. 52, № 5. S. 116—130.

7. *Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
Godunov S. K., Zabrodin A. V., Ivanov M. Ya., Krayko A.N., Prokopov G.P. Chislennoe reshenie mnogomernykh zadach gazovoy dinamiki. M.: Nauka, 1976.

8. *Абузяров М. Х., Баженов В. Г., Кочетков А. В.* О новом эффективном подходе к повышению точности схемы Годунова // Прикладные проблемы прочности и пластичности. Методы решения. Всесоюз. межвуз. сб. Горький: Изд-во ГГУ, 1987. С. 43—49.
Abuzyarov M.Kh., Bazhenov V. G., Kochetkov A. V. O novom effektivnom podkhode k povysheniyu tochnosti skhemy Godunova // Prikladnye problemy prochnosti i plastichnosti. Metody resheniya. Vsesoyuz. mezhvuz. sb. Gorkiy: Izd-vo GGU, 1987. S. 43—49.

9. *Абузяров М. Х., Баженов В. Г., Кочетков А. В.* О монотонизации схемы Годунова второго порядка точности введением схемной вязкости // Там же. Исследование и оптимизация конструкций. С. 85—90.
Abuzyarov M.Kh., Bazhenov V. G., Kochetkov A. V. O monotonizatsii skhemy Godunova vtorogo poryadka tochnosti vvedeniem skhemnoy vyazkosti // Tam zhe. Issledovanie i optimizatsiya konstruktsiy. S. 85—90.

10. Абузяров М. Х. О повышении точности схемы Годунова для решения задач гидрогазодинамики // XIII конф. молодых ученых Московского физ.-тех. ин-та. 1988. Т. 2. С. 30—37.

11. *Abouziarov M., Aiso H.* An application of retroactive characteristic method to conservative scheme for structure problems (elastic-plastic flows) // 10 Int. Conf. Hyperbolic Problems, Theories, Numerics, Applications. Osaka, September 2004. Yokohama Publishers, Inc., 2006. P. 223—230.

12. *Abouziarov M., Aiso H., Takahashi T.* An application of conservative scheme to structure problems // Mathematical Analysis in Fluid and Gas Dynamics. Research Institute of Mathematics of Kyoto University, 2004. No 1353. P. 192—201.

13. *Годунов С. К.* Элементы механики сплошной среды. М.: Наука, 1978.
Godunov S.K. Elementy mekhaniki sploshnoy sredy. M.: Nauka, 1978.

14. *Кукуджанов В. Н.* Метод расщепления упругопластических уравнений // Механика твердого тела. 2004. № 1. С. 98—108.
Kukudzhanov V. N. Metod rasshchepleniya uprugoplasticheskikh uravneniy // Mekhanika tverdogo tela. 2004. № 1. S. 98—108.

15. *Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н.* Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. М.: Наука, 1978.
Rozhdestvenskiy B. L., Yanenko N. N. Sistemy kvazilineynykh uravneniy i ikh prilozheniya k gazovoy dinamike. M.: Nauka, 1978.

16. *Абузяров М. Х., Кочетков А. В., Крылов С. В., Цветкова Е. В.* Численное моделирование детонации и воздействия газокумулятивных зарядов на преграды // Выч. мех. сплош. сред. 2008. Т. 1, № 2. С. 5—15.
Abuzyarov M.Kh., Kochetkov A. V., Krylov S. V., Tsvetkova E. V. Chislennoe modelirovanie detonatsii i vozdeystviya gazokumulyativnykh zaryadov na pregrady // Vych. mekh. splosh. sred. 2008. T. 1, № 2. S. 5—15.

17. *Баженов В. Г., Зефиров С. В., Кочетков А. В., Крылов С. В., Фельдгун В. Р.* Пакет программ "Динамика-2" для решения плоских и осесимметричных задач нестационарного взаимодействия конструкций со сжимаемыми средами // Мат. моделирование. 2000. Т. 12, № 6.

С. 67—72.
Bazhenov V. G., Zefirov S. V., Kochetkov A. V., Krylov S. V., Feldgun V. R. Paket programm "Dinamika-2" dlya resheniya ploskikh i osesimmetrichnykh zadach nestatsionarnogo vzaimodeystviya konstruktsiy so szhimaemymi sredami // Mat. modelirovanie. 2000. T. 12, № 6. S. 67—72.

18. *Абузяров М. Х., Крылов С. В., Цветкова Е. В.* Моделирование упругопластического взаимодействия с помощью программного комплекса UPSGOD // Проблемы прочности и пластичности. 2013. Вып. 75(1). С. 25—32.
Abuzyarov M.Kh., Krylov S. V., Tsvetkova E. V. Modelirovanie uprugoplasticheskogo vzaimodeystviya s pomoshchyu programmnogo kompleksa UPSGOD // Problemy prochnosti i plastichnosti. 2013. Vyp. 75(1). S. 25—32.

19. *Дерюгин Ю. Н., Саразов А. В., Жучков В. Н.* Особенности построения методики расчета на сетках типа "химера" для неструктурированных сеток // Мат. моделирование. 2017. Т. 29, № 2, С. 106—118.
Deryugin Yu. N., Sarazov A. V., Zhuchkov V. N. Osobennosti postroeniya metodiki rascheta na setkakh tipa "khimera" dlya nestrukturirovannykh setok // Mat. modelirovanie. 2017. T. 29, № 2, S. 106—118.

20. *Меньшов И. С., Корнев М. А.* Метод свободной границы для численного решения уравнений газовой динамики в областях с изменяющейся геометрией // Там же. 2014. Т. 26, № 5, С. 99—112.
Menshov I. S., Kornev M. A. Metod svobodnoy granitsy dlya chislennogo resheniya uravneniy gazovoy dinamiki v oblastyakh s izmenyayushcheysya geometriey // Tam zhe. 2014. T. 26, № 5, S. 99—112.

21. *Abuziarov K. M., Abuziarov M. H., Kochetkov A. V.* 3D fluid structure interaction problem solving method in euler variables based on the modified Godunov scheme // Materials Physics and Mechanics. 2016. T. 28, No 1—2. P. 1—5.

22. *Янилкин Ю. В., Карпенко И. И., Гаврилова Е. С., Дегтяренко Л. И., Маврина Е. А., Топорова О. О.* Методы численного моделирования детонации и горения ВВ в эйлеровых газодинамических расчетах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 3. С. 16—28.
Yanilkin Yu. V., Karpenko I. I., Gavrilova E. S., Degtyarenko L. I., Mavrina E. A., Toporova O. O. Metody chislennogo modelirovaniya detonatsii i goreniya VV v eylerovykh gazodinamicheskikh raschetakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2011. Vyp. 3. S. 16—28.

Статья поступила в редакцию 11.03.21.

УДК 519.6

ОБ ОДНОМ СЧЕТНОМ ЭФФЕКТЕ НЕФИЗИЧНОГО ПРОГРЕВА ВЕЩЕСТВА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРЕНОСА ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. И. Бочков, В. Ю. Резчиков, В. В. Сучкова
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

При численном решении задач переноса теплового излучения могут проявляться различные сеточные и численные эффекты, которые не связаны с физикой моделируемых процессов и затрудняют правильную интерпретацию результатов расчетов. В статье рассмотрен счетный эффект, описание которого авторы не встречали в научной литературе. Этот счетный эффект нефизичного (не являющегося решением системы интегродифференциальных уравнений переноса излучения и не укладывающегося в рамки описания физического процесса) ускоренного прогрева вещества вызван сочетанием двух факторов: сильной анизотропии входящего потока излучения по направлениям полета частиц и особенностью некоторых разностных схем второго порядка точности. Приведена постановка одномерной модельной задачи, в которой наглядно проявляется счетный эффект, и установлены причины его возникновения. Для борьбы с обнаруженным эффектом предложено несколько модификаций расчетной схемы, которые позволяют практически полностью избавиться от артефактов в численном решении.

Ключевые слова: перенос излучения, численное моделирование, счетный эффект.

Введение

В работах [1, 2] приведено описание сеточных и численных эффектов, которые проявляются при численном моделировании задач переноса теплового излучения. Эти эффекты не связаны с физикой описываемых процессов и мешают правильной интерпретации результатов расчетов.

В настоящей статье приведен еще один счетный эффект, описание которого авторы не встречали в научной литературе. Этот эффект был обнаружен при проведении расчетов задач переноса излучения в двумерной постановке на ортогональных пространственных сетках. Он заключается в ускоренном прогреве вещества, не соответствующем физике исследуемого процесса. Проведенные численные исследования показали, что эффект нефизичного прогрева вещества вызван сочетанием двух факторов: сильной анизотропии входящего потока излучения по направлениям полета частиц и особенностью разностных схем второго порядка точности, использующих дополнительные аппроксимационные соотношения (например, DD-схемы [3]).

Постановка задачи

Рассмотрим систему уравнений переноса излучения и энергии в плоском слое в приближении серой материи без учета движения среды и рассеяния:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial I}{\partial t} + \mu\frac{\partial I}{\partial x} + \alpha I = \alpha B; \tag{1}$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \alpha\left(I^{(0)} - 2B\right), \quad I^{(0)} = \int\limits_{-1}^{1} I d\mu, \tag{2}$$

где c — скорость света в вакууме; t — время; x — пространственная координата; μ — косинус угла между направлением полета фотонов и осью OX; $I(t,x,\mu)$ — интенсивность излучения в момент времени t в точке x в направлении μ; $\alpha(x,T)$ — коэффициент поглощения излучения; $B(T) = \sigma T^4$ — интенсивность равновесного излучения ($\sigma = 2\,058$); $T(t,x)$ — температура вещества; $\varepsilon(T)$ — удельная внутренняя энергия вещества; $I^{(0)}$ — плотность потока энергии излучения.

Система уравнений (1), (2) решается в области фазового пространства $D = \{t_0 \le t \le t_k;\ a \le x \le b; -1 \le \mu \le 1\}$ с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} I(t,x,\mu)|_{t=t_0} &= I_0(x,\mu), \qquad & T(t,x)|_{t=t_0} &= T_0(x);\\ I(t,a,\mu)|_{\mu>0} &= I_a(t,\mu), \qquad & I(t,b,\mu)|_{\mu<0} &= I_b(t,\mu). \end{aligned}$$

Алгоритм численного решения

Введем разностную сетку по переменным t (индекс n), x (индекс i) и μ (индекс j), и аппроксимируем уравнение (1), используя DS_n-метод [3]:

$$\frac{1}{c}\frac{I^{n+1}_{i+1/2,\,j+1/2} - I^{n}_{i+1/2,\,j+1/2}}{\Delta t} + \mu_{j+1/2}\frac{I^{n+1}_{i+1,\,j+1/2} - I^{n+1}_{i,\,j+1/2}}{\Delta x} + \alpha^{n+1}_{i+1/2} I^{n+1}_{i+1/2,\,j+1/2} = \alpha^{n+1}_{i+1/2} B^{n+1}_{i+1/2}, \tag{3}$$

где $\Delta t \equiv \Delta t^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$, $\Delta x \equiv \Delta x_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i$.

Для замыкания системы сеточных уравнений (3) по пространственной переменной x воспользуемся дополнительным аппроксимационным соотношением WDD-схемы [4]:

$$I^{n+1}_{i+1/2,\,j+1/2} = \begin{cases} \delta I^{n+1}_{i+1,\,j+1/2} + (1-\delta)\, I^{n+1}_{i,\,j+1/2}, & \mu > 0;\\ \delta I^{n+1}_{i,\,j+1/2} + (1-\delta)\, I^{n+1}_{i+1,\,j+1/2}, & \mu < 0, \end{cases} \tag{4}$$

где $0{,}5 \le \delta \le 1$ — вес, определяющий порядок аппроксимации: при $\delta = 0{,}5$ получаем DD-схему второго порядка аппроксимации, при $\delta = 1$ — ST-схему первого порядка.

В общем случае при $\delta < 1$ WDD-схема является неположительной и немонотонной. Для обеспечения положительности сеточного решения применяется коррекция Латропа *zero fix up*, также известная как метод балансного зануления [5, 6].

Уравнение энергии (2) аппроксимируется согласованно с уравнением (1):

$$\frac{\varepsilon^{n+1}_{i+1/2} - \varepsilon^{n}_{i+1/2}}{\Delta t} = \alpha^{n+1}_{i+1/2}\left(I^{(0)n+1}_{i+1/2} - 2B^{n+1}_{i+1/2}\right), \tag{5}$$

где $I^{(0)n+1}_{i+1/2} = \sum\limits_j I^{n+1}_{i+1/2,\,j+1/2}\Delta\mu_{j+1/2}, \quad \Delta\mu_{j+1/2} = \mu_{j+1} - \mu_j$.

Для численного решения полученной системы разностных уравнений (3)—(5) используем метод оценки итерационных отклонений Морозова [7]. В результате система уравнений решается в два этапа.

На первом этапе $(s+1)$-го итерационного шага применяется метод простой итерации по источнику:

$$\frac{1}{c}\frac{I^{n+1,\,s+1/2}_{i+1/2,\,j+1/2} - I^{n}_{i+1/2,\,j+1/2}}{\Delta t} + \mu_{j+1/2}\frac{I^{n+1,\,s+1/2}_{i+1,\,j+1/2} - I^{n+1,\,s+1/2}_{i,\,j+1/2}}{\Delta x} + \alpha^{n+1,\,s}_{i+1/2} I^{n+1,\,s+1/2}_{i+1/2,\,j+1/2} = \alpha^{n+1,\,s}_{i+1/2} B^{n+1,\,s}_{i+1/2}. \tag{6}$$

На втором этапе $(s+1)$-го итерационного шага решается уравнение относительно поправки $\Delta I^{s+1} = I^{s+1} - I^{s+1/2}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c}\frac{\Delta I^{n+1,\,s+1}_{i+1/2,\,j+1/2}}{\Delta t} + \mu_{j+1/2}\frac{\Delta I^{n+1,\,s+1}_{i+1,\,j+1/2} - \Delta I^{n+1,\,s+1}_{i,\,j+1/2}}{\Delta x} + \alpha^{n+1,\,s}_{i+1/2}\Delta I^{n+1,\,s+1}_{i+1/2,\,j+1/2} ={}&\\ = \alpha^{n+1,\,s}_{i+1/2}\left(B^{n+1,\,s+1}_{i+1/2} - B^{n+1,\,s}_{i+1/2}\right).& \end{aligned} \tag{7}$$

В уравнении (7) функция $B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}$ неизвестна, так как неизвестна температура $T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}$. Определим значение температуры из уравнения энергии на $(s+1)$-й итерации

$$\frac{\varepsilon_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}-\varepsilon_{i+1/2}^{n}}{\Delta t}=\alpha_{i+1/2}^{n+1,s}\left(I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}-2B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}\right),$$

воспользовавшись линеаризацией функции B и энергии ε:

$$B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}\approx B_{i+1/2}^{n+1,\,s}+\left.\frac{\partial B}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,s}}\left(T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}-T_{i+1/2}^{n+1,\,s}\right);$$

$$\varepsilon_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}\approx \varepsilon_{i+1/2}^{n+1,\,s}+\left.\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}}\left(T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}-T_{i+1/2}^{n+1,\,s}\right).$$

В результате получим выражение для вычисления $T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}$:

$$T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}+P^s\left[\frac{\varepsilon_{i+1/2}^{n}-\varepsilon_{i+1/2}^{n+1,\,s}}{\Delta t}+\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\left(I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}-2B_{i+1/2}^{n+1,\,s}\right)\right],$$

$$P^s=\left(\frac{1}{\Delta t}\left.\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}}+2\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\left.\frac{\partial B}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}}\right)^{-1}.$$

Используя полученное выражение, получим выражение для функции $B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}$:

$$B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}\approx B_{i+1/2}^{n+1,\,s}+P^s\left.\frac{\partial B}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}}\left[\frac{\varepsilon_{i+1/2}^{n}-\varepsilon_{i+1/2}^{n+1,\,s}}{\Delta t}+\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\left(I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}-2B_{i+1/2}^{n+1,\,s}\right)\right].$$

С использованием уравнения энергии с предыдущей, s-й, итерации запишем выражение для $B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}$ в поправочной форме относительно функции плотности излучения:

$$B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}\approx B_{i+1/2}^{n+1,\,s}+P^s\left.\frac{\partial B}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}}\left[\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\Delta I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}+\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\left(I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1/2}-I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s)}\right)\right],$$

где $\Delta I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}=\sum\limits_j \Delta I_{i+1/2,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1}\Delta\mu_{j+1/2}$.

Воспользуемся приближением

$$\Delta I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}\approx 2\Delta I_{i+1/2,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1}$$

и получим окончательный вид поправочного уравнения:

$$\frac{1}{c}\frac{\Delta I_{i+1/2,j+1/2}^{n+1,\,s+1}}{\Delta t}+\mu_{j+1/2}\frac{\Delta I_{i+1,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1}-\Delta I_{i,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1}}{\Delta x}+\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\Delta I_{i+1/2,j+1/2}^{n+1,\,s+1}\left(1-2\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}P^s\left.\frac{\partial B}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}}\right)=$$
$$=P^s\left(\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\right)^2\left(I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1/2}-I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s)}\right)\left.\frac{\partial B}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s}}. \tag{8}$$

После решения уравнения простой итерации (6) и поправочного уравнения (8) получим решение на $(s+1)$-й итерации

$$I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}=\max\left(0;\,I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1/2}+\Delta I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1}\right).$$

Расчет температуры $T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1}$ производится итерационно с использованием линеаризованного уравнения энергии:

$$T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1,\,\nu+1} = T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1,\,\nu} + P^{s+1,\,\nu}\left[\frac{\varepsilon_{i+1/2}^{n} - \varepsilon_{i+1/2}^{n+1}\left(T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1,\,\nu}\right)}{\Delta t} + \alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\left(I_{i+1/2}^{(0)n+1,\,s+1} - 2B_{i+1/2}^{n+1,\,s+1,\,\nu}\right)\right],$$

$$P^{s+1,\,\nu} = \left(\frac{1}{\Delta t}\left.\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1,\,\nu}} + 2\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}\left.\frac{\partial B}{\partial T}\right|_{T=T_{i+1/2}^{n+1,\,s+1,\,\nu}}\right)^{-1},$$

где ν — номер итерации.

Постановка расчетов модельных задач

Рассмотрим плоский слой $0 \le x \le 2$ из оптически плотного вещества (коэффициент поглощения $\alpha = \min\left(10^3/T^3;\, 10^6\right)$; уравнение состояния $\varepsilon(T) = 0{,}81\,T$). На левой границе слоя задан поток излучения, на правой границе — нулевой входящий поток.

Рассмотрим два варианта задания входящего потока по переменной μ на границе $x = 0$:

1) $I(0,\ \mu)|_{\mu>0} = B\left(T = \sqrt{0{,}5}\right) \equiv \dfrac{\sigma}{4}$; 2) $I(0,\ \mu)|_{\mu>0} = \begin{cases} B(T=1) \equiv \sigma, & 0 < \mu \le 0{,}5; \\ 0, & \mu > 0{,}5. \end{cases}$

Начальная температура $T_0(x) = 10^{-7}$; начальное распределение излучения $I_0(x,\ \mu) = B(T_0(x))$.

Входящий поток для варианта 1 является изотропным, для варианта 2 — анизотропным. При этом отметим, что оба варианта по интегральной величине входящего потока идентичны и, учитывая физическую постановку задачи, должны иметь близкие решения.

Расчеты проводились с постоянным временным шагом, равным 10^{-5}, до момента времени $t = 1$. Относительная точность сведения итераций по температуре задавалась равной $\varepsilon_T = 10^{-10}$, относительная точность сведения итераций по плотности потока излучения — $\varepsilon_I = 10^{-8}$.

Для аппроксимации уравнения по угловой переменной μ задавалась равномерная сетка с числом интервалов 20.

Результаты расчетов модельных задач по DD-схеме

На рис. 1 приведены профили температуры вещества на момент окончания расчетов, проведенных с использованием DD-схемы на сгущающихся равномерных пространственных сетках. Из рисунка видно:

1. В расчетах с изотропным потоком решение очень слабо зависит от пространственной сетки.
2. В расчетах с анизотропным потоком присутствует существенная зависимость решения от пространственной сетки. При этом только на самой подробной сетке результаты расчетов согласуются с физикой процесса прогрева излучением заданного вещества, а на более грубых сетках прогрев вещества не соответствует физической постановке задачи.

На рис. 2 приведено схематичное распространение излучения от левой границы системы для двух направлений полета фотонов (значений μ), соответствующих ненулевому и нулевому входящим потокам. С помощью этого рисунка поясним, чем вызван обнаруженный счетный эффект нефизичного прогрева вещества анизотропным потоком излучения:

1. При ненулевом входящем потоке (см. рис. 2, *a*) в соответствии с постановкой задачи прогрев первой счетной ячейки осуществляется входящим потоком излучения I_{IN}^{a}. При этом согласно физике процесса прогрев происходит постепенно и до определенного момента времени излучение из ячейки не выходит. В этом случае из дополнительного соотношения DD-схемы следует

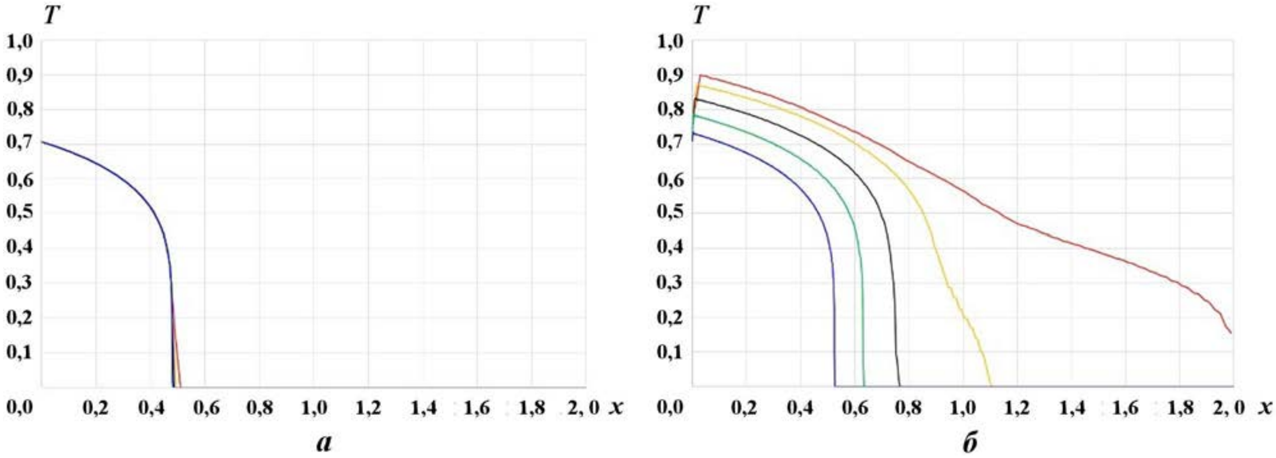

Рис. 1. Профиль температуры вещества на момент окончания расчетов по DD-схеме: *а* — с изотропным входящим потоком; *б* — с анизотропным входящим потоком; —— — $h = 0{,}02$; —— — $h = 0{,}01$; —— — $h = 0{,}005$; —— — $h = 0{,}0025$; —— — $h = 0{,}0125$

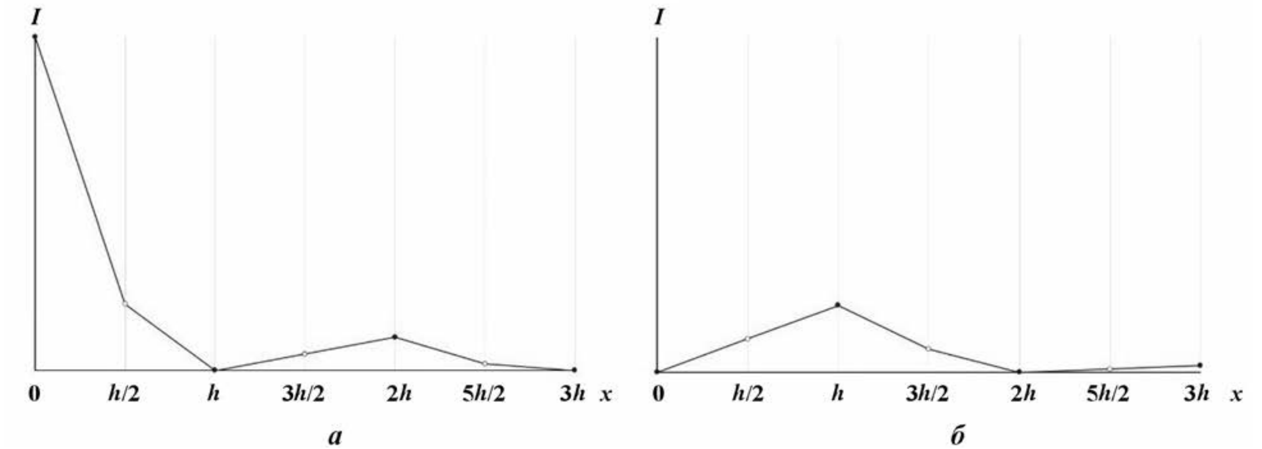

Рис. 2. Схематичное распространение излучения от левой границы системы для двух направлений полета частиц в расчете с анизотропным входящим потоком по DD-схеме: *а* — ненулевой входящий поток; *б* — нулевой входящий поток

$I_h^a = 2I_{h/2}^a - I_{IN}^a < 0$, т. е. схема как бы "знает", что излучение находится у левой границы, и не выпускает его (происходит коррекция отрицательного решения методом балансного зануления[*]).

2. Для направления полета частиц с нулевым входящим потоком (см. рис. 2, *б*) ситуация является обратной: будучи уже немного прогретой входящим потоком I_{IN}^a первая ячейка начинает выпускать излучение, так как из дополнительного соотношения DD-схемы $I_h^b = 2I_{h/2}^b > 0$. В этом случае схема как бы "предполагает", что излучение находится у правой границы ячейки, и оно выпускается.

3. Во второй счетной ячейке имеет место противоположная ситуация, т. е. для направления, в котором задан ненулевой входящий поток, вторая ячейка начинает выпускать из себя излучение, а для направления с нулевым входящим потоком излучение запирается в ней.

[*]Вместо балансного зануления можно использовать другие методы коррекции решения, например пересчет по St-схеме. Однако использование в расчетах DD/St-схемы никак не влияет на счетный эффект.

Таким образом, волнообразный характер распространения излучения по веществу, при котором пространственное распределение интенсивности излучения для разных направлений полета частиц находится в противофазе, является основной причиной образования счетного эффекта нефизичного прогрева вещества анизотропным потоком излучения. Заметим, что при изотропном входящем потоке в численном решении для разных направлений полета частиц противофаз не возникает и результаты расчетов являются корректными даже на относительно грубых пространственных сетках. Как показано на рис. 1, *б*, с измельчением пространственной сетки счетный эффект уменьшается и наблюдается сходимость численного решения к физически корректному результату.

Модификации расчетной схемы

С физической точки зрения в рассмотренной задаче анизотропный входящий поток излучения должен в достаточно узкой приграничной области трансформироваться в изотропный. Поэтому для преодоления обнаруженного счетного эффекта было рассмотрено три модификации расчетной схемы, направленные на *изотропизацию* потока излучения, выходящего из первой приграничной ячейки при $\mu > 0$. В качестве таких модификаций использовались следующие схемы:

1. **DDc_ST** — ST-схема первого порядка точности.
2. **DDc_I** — схема, в которой для замыкания системы сеточных уравнений совместно с уравнением баланса (3) использовалось дополнительное соотношение

$$I_{i+1,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1/2} = I_{i,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1/2} e^{-\widetilde{L}} + \frac{\widetilde{F}_{i+1/2}^{n+1,\,s}}{\widetilde{\alpha}_{i+1/2}^{n+1,\,s}} \left(1 - e^{-\widetilde{L}}\right).$$

Здесь $\widetilde{L} = \widetilde{\alpha}_{i+1/2}^{n+1,\,s} \dfrac{\Delta x}{|\mu|}$; $\widetilde{\alpha}_{i+1/2}^{n+1,\,s} = \alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s} + \dfrac{1}{c\Delta t}$; $\widetilde{F}_{i+1/2}^{n+1,\,s} = F_{i+1/2}^{n+1,\,s} + \dfrac{I_{i+1/2,\,j+1/2}^{n}}{c\Delta t}$; $F_{i+1/2}^{n+1,\,s}$ — правая часть в уравнении баланса $\Big($в случае уравнения (1) без учета рассеяния и внешних источников $F_{i+1/2}^{n+1,\,s} \equiv \alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s} B_{i+1/2}^{n+1,\,s}\Big)$.

Эта схема получается в предельном случае при разбиении ячейки на бесконечное число подъячеек, рассчитываемых по DD-схеме, и эквивалентна SC-схеме [8] для стационарного уравнения. Схема обеспечивает положительность решения и обладает первым порядком точности.

3. **DDc_SC** — схема, в которой для замыкания системы сеточных уравнений совместно с уравнением баланса (3) использовалось дополнительное соотношение (на основе SC-схемы)

$$I_{i+1,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1/2} = I_{i+1/2,\,j+1/2}^{n+1,\,s+1/2}\, e^{-L} + \frac{F_{i+1/2}^{n+1,\,s}}{\alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s}} \left(1 - e^{-L}\right),$$

где $L = \alpha_{i+1/2}^{n+1,\,s} \dfrac{\Delta x}{2\,|\mu|}$.

Несложно показать, что эта схема также обеспечивает положительность решения.

Особо отметим, что модифицированные схемы используются только в первой приграничной ячейке при $\mu > 0$, а во всех остальных случаях применяется DD-схема.

На рис. 3 приведены профили температуры вещества на момент окончания расчетов по модифицированным схемам. Из рисунка видно:

1. Переход на DDc_ST-схему позволил, хоть и не полностью, но в значительной мере уменьшить счетный эффект нефизичного прогрева вещества анизотропным потоком излучения. Заметим, что на рис. 3, *б* "выброс" температуры вещества при $x > 0{,}45$ в расчетах на грубых пространственных сетках также вызван противофазами в решении для разных направлений полета частиц, начало которых сформировалось внутри вещества, а не у его границы.

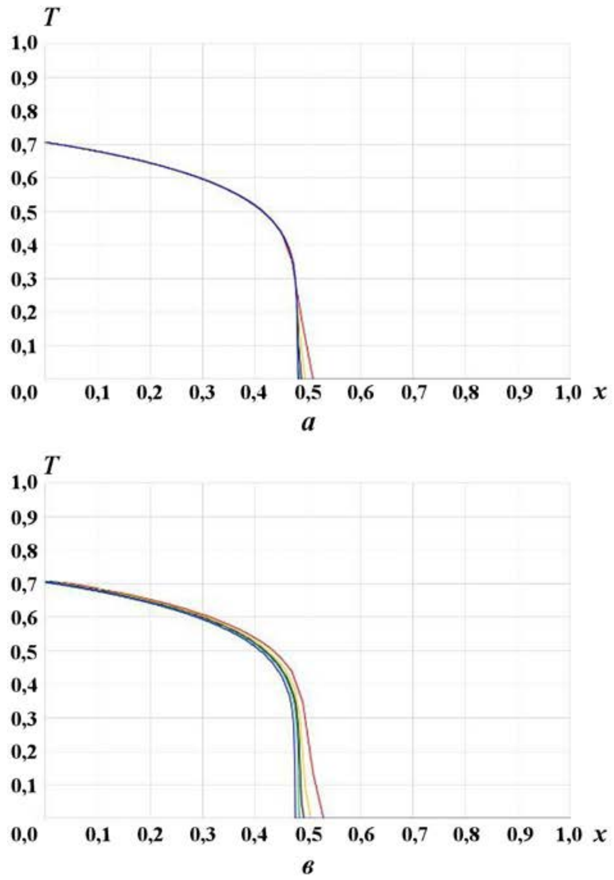

Рис. 3. Профили температуры вещества на момент окончания расчетов: *а* — с изотропным входящим потоком по DD-схеме; *б*—*г* — с анизотропным входящим потоком по схемам DDc_ST, DDc_I и DDc_SC соответственно; —— — $h = 0{,}02$; —— — $h = 0{,}01$; —— — $h = 0{,}005$; —— — $h = 0{,}0025$; —— — $h = 0{,}0125$

2. При использовании DDc_I- и DDc_SC-схем никаких счетных артефактов в решении нет и результаты расчетов на всей совокупности рассмотренных пространственных сеток очень близки как между собой, так и к физически корректному результату.

В рассмотренных расчетах на равномерных пространственных сетках минимальный размер ячейки составлял 0,00125, и результаты расчетов на сетке с такими ячейками с изотропным и анизотропным входящими потоками оказались близки (см. рис. 3). Однако при дальнейшем измельчении сетки результаты расчетов по DD-схеме с анизотропным потоком сходятся к несколько другому решению. Для иллюстрации этого факта на рис. 4 показаны результаты расчетов задач с изотропным и анизотропным потоками на подробной неравномерной сетке с начальным шагом $h_0 = 10^{-8}$ и знаменателем $q = 1{,}01$ $\left(h_{i+1/2} = q^i h_0\right)$.

Заключение

В работе описан обнаруженный счетный эффект нефизичного прогрева вещества анизотропным потоком излучения в расчетах по DD-схеме. Установлены причины возникновения этого эффекта, а также предложены три модификации расчетной схемы, которые позволяют в значительной мере повысить точность расчетов. При этом модификации DDc_I и DDc_SC для всей совокупности рассмотренных пространственных сеток позволяют практически полностью избавиться от артефактов в численном решении, результаты расчетов по этим схемам очень близки между собой и к физически обоснованным результатам.

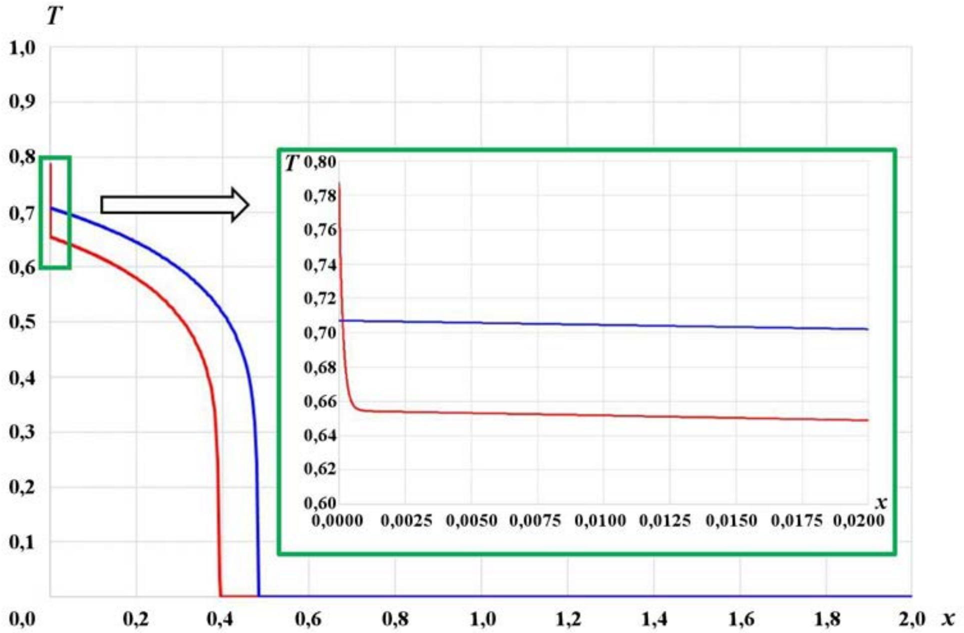

Рис. 4. Профиль температуры вещества на момент окончания расчетов по DD-схеме на неравномерной сетке с начальным шагом $h_0 = 10^{-8}$ и знаменателем $q = 1{,}01$ с изотропным (——) и анизотропным (——) входящими потоками

Список литературы

1. *Шестаков А. А.* Сеточные эффекты при численном моделировании переноса теплового излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2018. Вып. 4. С. 29—45.
   Shestakov A. A. Setochnye effekty pri chislennom modelirovanii perenosa teplovogo izlucheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2018. Vyp. 4. S. 29—45.

2. *Шестаков А. А.* Численные эффекты при численном моделировании переноса теплового излучения // Там же. 2019. Вып. 1. С. 44—56.
   Shestakov A. A. Chislennye effekty pri chislennom modelirovanii perenosa teplovogo izlucheniya // Tam zhe. 2019. Vyp. 1. S. 44—56.

3. *Карлсон Б.* Численное решение задач кинетической теории нейтронов // Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1963.
   Karlson B. Chislennoe reshenie zadach kineticheskoy teorii neytronov // Teoriya yadernykh reaktorov. M.: Atomizdat, 1963.

4. *Басс А. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучений. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР, 1986.
   Bass A. P., Voloshchenko A. M., Germogenova T. A. Metody diskretnykh ordinat v zadachakh o perenose izlucheniy. M.: IPM im. M. V. Keldysha AN SSSR, 1986.

5. *Елесин В. А., Трощиёв В. Е., Федянин В. И., Юдинцев В. Ф.* Численная методика и организация программы для решения многогруппового нестационарного кинетического уравнения // Комплексы программ математической физики. Новосибирск, 1972.
   Elesin V. A., Troshchiyev V. E., Fedyanin V. I., Yudintsev V. F. Chislennaya metodika i organizatsiya programmy dlya resheniya mnogogruppovogo nestatsionarnogo kineticheskogo uravneniya // Kompleksy program matematicheskoy fiziki. Novosibirsk, 1972.

6. *Карлсон Б. Г., Латроп К. Д.* Теория переноса. Метод дискретных ординат // Вычислительные методы в физике реакторов. М.: Атомиздат, 1972.
Karlson B. G., Latrop K. D. Teoriya perenosa. Metod diskretnykh ordinat // Vychislitelnye metody v fizike reaktorov. M.: Atomizdat, 1972.
7. *Морозов В. Н.* О решении кинетических уравнений с помощью S_n-метода // Теория и методы расчета ядерных реакторов. М.: Госатомиздат, 1962.
Morozov V. N. O reshenii kineticheskikh uravneniy s pomoshchyu S_n-metoda // Teoriya i metody rascheta yadernykh reaktorov. M.: Gosatomizdat, 1962.
8. *Lathrop K. D.* Spatial Differencing of the Transport Equation: Positivity vs Accuracy // J. Comp. Phys. 1969. Vol. 4. P. 475—498.

Статья поступила в редакцию 07.06.21.

УДК 519.6

МЕТОДИКА "ЛОГОС-ВОЛНА" РАСЧЕТА ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ С УЧЕТОМ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ПОДВИЖНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ

Е. А. Веселова, Ю. Н. Дерюгин, Д. К. Зеленский
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представлена методика параллельного расчета двумерных задач газовой динамики с теплопроводностью на геометрически адаптивных неструктурированных сетках. Геометрическая адаптация связана с выделением в решении основных особенностей, таких как ударные волны и контактные разрывы. Скорость движения разрывов и параметры на разрывах определяются из решения задачи Римана о распаде разрыва. Смещение внутренних узлов сетки определяется методом интерполяции по смещению граничных узлов.

Численный метод основан на методе расщепления, решении уравнений Эйлера явным методом на подвижной сетке и решении уравнения теплопроводности неявным методом на неподвижной сетке. Разностные уравнения получены дискретизацией исходных уравнений в интегральной форме квадратурными формулами прямоугольников. При решении уравнений Эйлера численные конвективные потоки определяются на основе решения задачи о распаде разрыва. Для повышения точности моделирования предраспадные параметры потока определяются с использованием линейной либо квадратичной реконструкции решения. В задачах со сферической симметрией с целью уменьшения немонотонности в численном решении применяется алгоритм доворота вектора скорости у предраспадных параметров потока. Тепловые потоки на гранях аппроксимируются по верхнему временному слою центральными разностями. Для решения неявных разностных уравнений используется итерационный метод Ньютона. Получающаяся в результате аппроксимации система линейных алгебраических уравнений относительно приращения температуры решается с использованием параллельных решателей из библиотеки PMLP. Возможности методики проиллюстрированы на ряде тестовых задач.

Ключевые слова: газовая динамика, теплопроводность, схема расщепления, разностная схема, подвижные сетки, распараллеливание вычислений, тестовые расчеты.

Введение

Данная работа посвящена созданию методики параллельного расчета двумерных задач газовой динамики с теплопроводностью на геометрически адаптивных неструктурированных сетках. Математическая модель, используемая для описания процессов распространения ударных волн, как и в работах, опубликованных в сборнике [1], основана на уравнениях многокомпонентной газовой динамики и уравнении переноса излучения в диффузионном приближении [2]. Расчетная методика построена на основе использования неструктурированных подвижных сеток, метода расщепления по физическим процессам, явного метода интегрирования уравнений Эйлера и неявного метода решения уравнения теплопереноса.

Счетный шаг состоит из расчета деформации сетки, которая связана с движением выделенных разрывов, и решения двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью. Граничные условия на выделенных разрывах разрешаются методом распада разрыва, в результате определяется скорость смещения граней. По изменению положения выделенных разрывов затем производится перестройка сетки. На первом этапе решения уравнений интегрируются уравнения Эйлера на подвижной сетке. Разностные уравнения получены дискретизацией исходных уравнений в интегральной форме квадратурными формулами прямоугольников. Численно конвективные потоки определяются на основе решения задачи о распаде разрыва [3]. Для повышения точности моделирования предраспадные параметры потока определяются с использованием линейной либо квадратичной реконструкции решения. В задачах со сферической симметрией с целью уменьшения немонотонности в численном решении применяется алгоритм доворота вектора скорости у предраспадных параметров потока [4]. На втором этапе решения уравнений учитывается источник энерговыделения. На третьем, заключительном, этапе решается уравнение теплопроводности на неподвижной неструктурированной сетке.

Расчетные формулы получаются путем интегрирования уравнений теплопроводности по контрольному объему ячейки. Тепловые потоки на гранях аппроксимируются по верхнему временному слою центральными разностями. Для решения неявных разностных уравнений используется итерационный метод Ньютона. Получающаяся в результате аппроксимации система линейных алгебраических уравнений относительно приращения температуры решается с использованием параллельных решателей из библиотеки PMLP [5]. Организация параллельных вычислений основана на алгоритмах пакета программ "Логос" [6].

Приводятся результаты расчета тестовых и модельных задач, принятых для тестирования двумерных методик [7—9].

Математическая модель

Рассматривается двумерное движение сплошной среды с учетом переноса лучистой энергии. Исходные уравнения в виде законов сохранения в декартовых ($\nu = 0$) и цилиндрических ($\nu = 1$) координатах имеют вид [2]:

– уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial y^\nu \rho v}{y^\nu \partial y} = 0; \tag{1}$$

– уравнение неразрывности α-компонента среды

$$\frac{\partial C_\alpha \rho}{\partial t} + \frac{\partial C_\alpha \rho u}{\partial x} + \frac{\partial y^\nu C_\alpha \rho v}{y^\nu \partial y} = 0, \tag{2}$$

где $C_\alpha = \dfrac{\rho_\alpha}{\rho}$ — массовая концентрация α-компонента;

– уравнение сохранения количества движения, записанное для компонент скорости (u, v):

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u^2 + p\right)}{\partial x} + \frac{\partial \rho u v}{y^\nu \partial y} = 0; \tag{3}$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v}{\partial x} + \frac{\partial y^\nu \rho v^2}{y^\nu \partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = 0; \tag{4}$$

– уравнение сохранения энергии

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u E + p u\right)}{\partial x} + \frac{\partial y^\nu \left(\rho v E + p v\right)}{y^\nu \partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\chi \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{y^\nu \partial y}\left(y^\nu \chi \frac{\partial T}{\partial y}\right) + \rho Q(x, y, t). \tag{5}$$

Уравнения (1)—(5) замыкаются уравнениями состояния

$$p = p(\rho, T); \quad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T); \quad \chi = \frac{4\sigma c}{3}\ell T^3,$$

где σ — постоянная Стефана—Больцмана; c — скорость света; $\ell = \ell(\rho, T)$ — росселандов пробег в веществе.

В расчетной области находится смесь N веществ. Уравнения состояния смеси берутся в виде

$$p = \sum_{\alpha=1}^{N} C_\alpha p_\alpha(\rho, T); \quad \varepsilon = \sum_{\alpha=1}^{N} C_\alpha \varepsilon_\alpha(\rho, T).$$

Росселандов пробег в смеси веществ определяется по формуле

$$\ell = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{C_\alpha}{\ell_\alpha(\rho, T)} \right)^{-1}.$$

Границами расчетной области являются: 1) границы симметрии потока; 2) *жесткий* поршень, на котором задается нормальная скорость границы; 3) *мягкий* поршень, когда задано давление; 4) ударная волна (УВ), на которой выполняются соотношения Ренкина—Гюгонио [2].

В задачах с учетом теплопроводности на границах области может быть дополнительно задана либо температура, либо тепловой поток. В частности, на УВ по теплопроводности задается условие отсутствия теплового потока. Хорошим приближением постановки граничного условия на внешних границах является условие излучения абсолютно черного тела, в котором тепловой поток определяется по формуле

$$q(t) = \frac{\sigma c}{4} T^4. \tag{6}$$

Сетка

Построение вычислительного алгоритма основано на конечно-объемном методе. Контрольные объемы (ячейки сетки) в плоском случае являются произвольными многоугольниками, покрывающими расчетную область без зазоров и наложений. В осесимметричном случае ячейкой сетки является тор, образованный вращением многоугольника вокруг оси OX. Многоугольник ограничен произвольным числом граней. При описании структур и алгоритмов будем использовать следующие обозначения: P — рассматриваемая ячейка; E — соседняя ячейка; f — грань; k — узел; σ — площадь ячейки; $\partial\sigma$ — периметр (совокупность ребер с обходом против часовой стрелки); Ω — объем ячейки; $\partial\Omega$ — поверхность, ограничивающая объем ячейки. Общий вид ячейки показан на рис. 1.

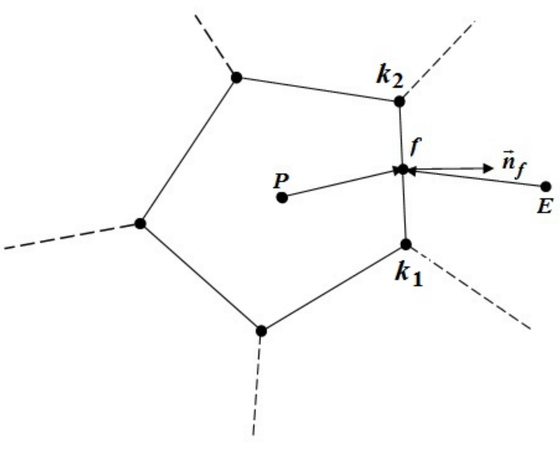

Рис. 1 Общий вид ячейки неструктурированной сетки

Сеточная модель делится на регионы в зависимости от способа построения и алгоритмов деформации сетки. Способ хранения информации о сеточной модели единообразен для всех регионов. Описание сетки содержит списки граней (*Face*), ячеек сетки (*Cell*) и узлов сетки (*Node*).

Грани подразделяются на внутренние (*Face_ Enternal*) и внешние (*Face_ External*). Каждая внутренняя грань разделяет две ячейки P и E (см. рис. 1). Считается, что нормаль к грани направлена от ячейки P с меньшим номером к ячейке E с большим номером. Для внешней грани нормаль направлена из ячейки. В описание грани также входят номера узлов, образующих грань, единичный вектор нормали, внешний относительно ячейки P, длина грани, площадь грани и координаты геометрического центра грани. В декартовой системе координат длина и площадь грани совпадают. Внешние грани сортируются по типам граничных условий.

В списке ячеек указываются тип ячейки, число и номера граней, образующих ячейку, координаты геометрического центра ячейки, объем ячейки, а также список определяющих расчетных параметров, которые относятся на каждый момент времени к центру ячейки.

Список узлов содержит тип узла (внешний, граница региона или внутренний), номер региона, в котором находится узел, и координаты узла.

Деформация сетки

Для определения нового положения сетки сначала разрешаются граничные условия на границах регионов методом распада разрыва [3]. В результате на гранях, описывающих эти границы, определяются так называемые *большие величины* (R, U, V, P, E) и вектор скорости движения самих граней $\left(\vec{W}\right)$, по которому определяется вектор сдвига граней $\left(\Delta\vec{R}_f = \tau\vec{W}\right)$. Для определения нового положения узлов производится интерполяция вектора сдвига из центров граней в узлы по массовому расходу:

$$\Delta\vec{R}_k = \frac{\Delta\vec{R}_f \left(RU_n\Delta S\right)_f + \Delta\vec{R}_{f+1} \left(RU_n\Delta S\right)_{f+1}}{\left(RU_n\Delta S\right)_f + \left(RU_n\Delta S\right)_{f+1}},$$

где U_n — нормальная составляющая скорости вещества на грани; ΔS — площадь грани.

Как и в работе [3], сформированная последовательность узлов $\left(\widetilde{\vec{R}_k} = \vec{R}_k^n + \Delta\vec{R}_k,\ k = 1, 2, ..., K\right)$ анализируется на *перехлест.* Окончательно новые значения координат узлов границ регионов определяются по заданному закону их расстановки на начальный момент времени. В качестве параметра закона расстановки используется расстояние от начала границы.

Новое положение внутренних узлов в регионе определяется по методу из работы [10]. В этом методе для вычисления перемещений всех внутренних узлов производится интерполяция функции смещения по вычисленным значениям координат граничных точек $\vec{R}_k$. Наиболее простая реализация метода заключается в стандартной интерполяции через весовые функции:

$$\Delta\vec{R}_j = \frac{\sum\limits_k \omega\left(\vec{R}_j, \vec{R}_k\right)\Delta\vec{R}_k}{\sum\limits_k \omega\left(\vec{R}_j, \vec{R}_k\right)}.$$

Здесь для каждого внутреннего узла j производится суммирование по всем граничным узлам k, а в качестве весовой функции $\omega\left(\vec{R}_j, \vec{R}_k\right)$ берется выражение вида

$$\omega\left(\vec{R}_j, \vec{R}_k\right) = \left\|R_k - R_j\right\|^p, \quad p < 0. \tag{7}$$

В соответствии с рекомендациями работы [10] в качестве весовой функции используется также более общее по сравнению с (7) выражение в виде суммы двух степенных членов, что позволяет более качественно рассчитывать приграничные деформации и сглаживать интерполяционную функцию вдали от границы расчетной области:

$$\omega\left(\vec{R}_j, \vec{R}_k\right) = A_j\left[\left(\frac{L}{\left\|R_k - R_{b_j}\right\|}\right)^a + \left(\frac{\alpha L}{\left\|R_k - R_{b_j}\right\|}\right)^b\right],$$

где A_j — вес узла, пропорциональный площади окружающих его граней; L — характерный размер области; αL — масштаб приграничной области; α и b — некоторые показатели степени. Численный эксперимент показывает [10], что значения $\alpha = 3$, $b = 5$ дают хорошее качество сеток в широком диапазоне деформаций. Оптимальное значение параметра L также может варьироваться для разных задач, но в общем случае может быть автоматически определено как максимальное расстояние между узлами сетки.

В частном случае, когда сетка структурирована, для расчета координат внутренних узлов в регионах используются, как и в [3], алгоритмы одномерной интерполяции по лучам и метод трансфинитной интерполяции.

Численный метод

В соответствии с принципом расщепления по физическим процессам решение двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью разбивается на три шага: 1) решение уравнений газовой динамики на подвижной неструктурированной сетке; 2) определение нового значения внутренней энергии за счет источников энерговыделения; 3) решение уравнения теплопроводности на неподвижной сетке.

Для описания методики решения уравнений Эйлера представим систему уравнений в следующем векторном виде:

$$\frac{\partial y^\nu \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial y^\nu \mathbf{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial y^\nu \mathbf{F}_y}{\partial y} + y^\nu \frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial y} = 0, \tag{8}$$

где $\nu = 0$ и $\nu = 1$ соответственно для плоской и цилиндрической геометрий; $\mathbf{Q}$ — вектор консервативных переменных; $\mathbf{F} = \mathbf{F}_x \vec{e}_x + \mathbf{F}_y \vec{e}_y$ — вектор потока, $\vec{e}_x, \vec{e}_y$ — единичные базисные векторы ортогональной декартовой или цилиндрической системы координат. Векторы $\mathbf{Q}$, $\mathbf{F}_x$, $\mathbf{F}_y$ и $\tilde{\mathbf{F}}$ имеют следующие компоненты:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho C_\alpha \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F_x} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho v u \\ \rho u E + p u \\ \rho u C_\alpha \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F_y} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v^2 \\ \rho v E + p v \\ \rho v C_\alpha \end{pmatrix}; \quad \tilde{\mathbf{F}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Интегрируя уравнения (8) по подвижной площади ячейки, используя формулу Гаусса—Остроградского и правило Лейбница, получаем следующий вид уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int\limits_{\Omega} \mathbf{Q} dV + \oint\limits_{\partial\Omega} (\mathbf{F}_n - \mathbf{Q} W_n)\, dS + \int\limits_{\Omega} \frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial y} dV = 0, \tag{9}$$

где W_n — нормальная составляющая скорости грани; $dV = y^\nu dxdy$ — объем ячейки; $dS = y^\nu \sqrt{dx^2 + dy^2}$ — площадь грани.

Воспользуемся теоремой о среднем, будем аппроксимировать интегралы в (9) с помощью квадратурной формулы прямоугольников. В качестве среднего значения функции в ячейке примем ее значение в центре ячейки, а в качестве среднего значения функции на грани — ее значение в центре грани. В этом случае получим полудискретный аналог уравнений (9):

$$\frac{(\mathbf{Q}\Delta V)_P^{n+1} - (\mathbf{Q}\Delta V)_P^n}{\tau} + \sum_f (\mathbf{F}_n - \mathbf{Q} W_n)_f^n \Delta S_f + \int\limits_{\Omega} \frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial y} dV = 0. \tag{10}$$

Определим $\dfrac{\partial p}{\partial y}$ в ячейке P на основании формулы Грина:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)_P = \frac{\oint\limits_{\partial\sigma} p n_y dl}{\Delta\sigma} = \frac{\sum\limits_f p_f \left(n_y\right)_f \Delta l_f}{\Delta\sigma_P}. \tag{11}$$

Проинтегрировав (11) по площади ячейки P, получим приближенно

$$\int\limits_{\sigma} \frac{\partial p}{\partial y} dV = \frac{\sum\limits_{f} p_f \left(n_y\right)_f \Delta l_f}{\Delta \sigma_P} \Delta V_P.$$

В результате получим окончательный дискретный аналог уравнений (10):

$$(\mathbf{Q}\Delta V)_P^{n+1} = \mathbf{Q}_P^n \frac{\Delta V_P^n}{\Delta V_P^{n+1}} - \frac{\tau}{\Delta V_P^{n+1}} \sum_f \left[\left(\mathbf{F}_n - \mathbf{Q} W_n\right) \Delta S + y_P^{\nu} \tilde{\mathbf{F}} n_y \Delta l \right]_f = 0. \tag{12}$$

Для осесимметричной геометрии значение y_P^{ν} центра ячейки определяется по формуле: $y_P^{\nu} = \dfrac{\Delta V_P}{\Delta \sigma_P}$.

Неизвестные газодинамические величины на боковых гранях криволинейных объемов, появляющиеся в (12) при определении конвективных потоков, определяются методом распада разрыва [3]. Для повышения порядка аппроксимации конвективных слагаемых используется одномерная линейная или квадратичная реконструкция решения относительно примитивных переменных.

Для одномерной реконструкции параметров на неструктурированной сетке строится шаблон из четырех точек (рис. 2), которые определяются на прямой, ортогональной грани ячейки P и проходящей через центр этой грани. Координаты точек шаблона определяются пересечением данной прямой с ортогональными линиями, проведенными через центры ячеек. Значения параметров в точках шаблона находятся с использованием вычисления градиентов от параметров в центрах ячеек:

$$q_{P'} = q_P + (\nabla q)_P \cdot \Delta \vec{R}_{PP'},$$

где через q обозначены примитивные переменные.

В линейной реконструкции [11] параметры в точках f^- и f^+ слева и справа от грани f определяются по формулам

$$q_{f^-} = q_{P'} + \frac{(\Delta q)_{P'}^+}{2}; \quad q_{f^+} = q_{E'} - \frac{(\Delta q)_{E'}^-}{2},$$

где

$$(\Delta q)_{P'}^+ = \min\mathrm{mod} \left(\left(q_{E'} - q_{P'}\right), \frac{l_{P'E'}}{l_{W'P'}} \left(q_{P'} - q_{W'}\right) \right);$$
$$(\Delta q)_{E'}^- = \min\mathrm{mod} \left(\left(q_{E'} - q_{P'}\right), \frac{l_{P'E'}}{l_{F'E'}} \left(q_{F'} - q_{E'}\right) \right).$$

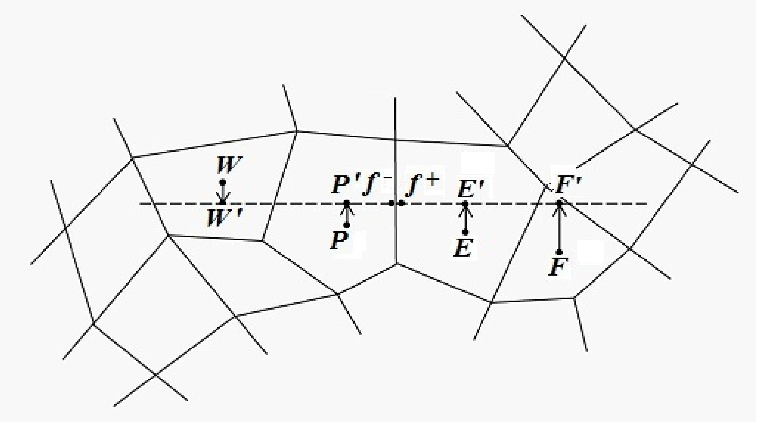

Рис. 2. Шаблон точек для реконструкции параметров на неструктурированной сетке

Здесь l — расстояние между точками, указанными в нижнем индексе; функция $\min\mathrm{mod}$ определяется следующим образом:

$$\min\mathrm{mod}(a,b) = \begin{cases} \min\left(|a|,|b|\right)\mathrm{sign}(a), & \text{если} \quad \mathrm{sign}(a) = \mathrm{sign}(b); \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

В квадратичной реконструкции [12] параметры слева и справа от грани f определяются по формулам

$$q_{f^-} = q_{P'} + \frac{1}{6}\left[2\left(\Delta q\right)^+_{P'} + \left(\Delta q\right)^-_{P'}\right]; \quad q_{f^+} = q_{E'} - \frac{1}{6}\left[2\left(\Delta q\right)^-_{E'} + \left(\Delta q\right)^+_{E'}\right],$$

где

$$\left(\Delta q\right)^+_{P'} = \min\ \mathrm{mod}\left(\left(q_{E'} - q_{P'}\right), 2\frac{l_{P'E'}}{l_{W'P'}}\left(q_{P'} - q_{W'}\right)\right);$$

$$\left(\Delta q\right)^-_{P'} = \min\ \mathrm{mod}\left(2\left(q_{E'} - q_{P'}\right), \frac{l_{P'E'}}{l_{W'P'}}\left(q_{P'} - q_{W'}\right)\right);$$

$$\left(\Delta q\right)^-_{E'} = \min\ \mathrm{mod}\left(\left(q_{E'} - q_{P'}\right), 2\frac{l_{P'E'}}{l_{F'E'}}\left(q_{F'} - q_{E'}\right)\right);$$

$$\left(\Delta q\right)^+_{E'} = \min\ \mathrm{mod}\left(2\left(q_{E'} - q_{P'}\right), \frac{l_{P'E'}}{l_{F'E'}}\left(q_{F'} - q_{E'}\right)\right).$$

Течение, возникающее в средах за фронтом УВ на больших расстояниях от эпицентра взрыва, приближается к сферически-симметричному. Вследствие того, что скорости в соседних ячейках, находящихся на одинаковом расстоянии от эпицентра, различаются по направлениям, при проецировании скоростей на нормаль к грани появляются нормальные составляющие векторов скоростей. При решении задачи о распаде разрыва это приводит к формированию потоков через грани и нарушению симметрии течения. Для уменьшения возникающей счетной ошибки при формировании предраспадных параметров на гранях производится доворот вектора скорости при его проецировании на грань [4]. Для определения доворота вектора скорости вводится полярная система координат (r,φ) с заданной точкой начала координат. Поворот вектора скорости осуществляется на угол $\Delta\varphi$ между центром ячейки и центром грани.

После решения уравнений газовой динамики определяется изменение энергии за счет источников энерговыделения (шаг 2). Поскольку энерговыделение связано с конкретным физическим веществом, то новое значение энергии определяется по формуле

$$\bar{\varepsilon}_P = \tilde{\varepsilon}_P + \tau\frac{(\rho_\alpha)_P}{\rho_P}Q(t^{n+1/2}),$$

где $\tilde{\varepsilon}_P$ — значение удельной внутренней энергии после шага 1 (газодинамического). По найденному значению энергии определяется значение температуры, которое находится из уравнения состояния по итерационной формуле Ньютона.

На заключительном шаге 3 находится новое значение температуры и внутренней энергии из решения уравнения теплопроводности на неподвижной сетке:

$$\frac{\partial y^\nu\rho\varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(y^\nu\chi\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(y^\nu\chi\frac{\partial T}{\partial y}\right). \tag{13}$$

Проинтегрируем (13) по площади ячейки, используя формулу Гаусса—Остроградского, и перейдем к объему ячейки. Тогда интегральный закон сохранения энергии представляется в виде

$$\int\limits_\Omega \frac{\partial\rho\varepsilon}{\partial t}dV = \oint\limits_{\partial\Omega}\chi\frac{\partial T}{\partial n}dS, \tag{14}$$

где введено обозначение $\chi\dfrac{\partial T}{\partial n} = \chi \operatorname{grad} T \cdot \vec{n}$.

Используя квадратурные формулы, заменим интегральные выражения разностными. Производную по времени будем аппроксимировать по схеме первого порядка:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\varepsilon^{n+1} - \bar{\varepsilon}}{\tau^n}.$$

Тогда уравнение (14) в полудискретном виде запишется как

$$(\rho \Delta V)_P \left(\frac{\varepsilon^{n+1} - \bar{\varepsilon}}{\tau^n}\right)_P - \sum_f \left(\chi \frac{\partial T}{\partial n}\right)_f \Delta S_f = 0. \tag{15}$$

Будем аппроксимировать $\displaystyle\sum_f \left(\chi \frac{\partial T}{\partial n}\right)_f \Delta S_f$ в каждой ячейке сетки по верхнему временному слою, тогда получим систему нелинейных разностных уравнений. Ее решение будем искать методом итераций по Ньютону. Для этого проведем линеаризацию внутренней энергии

$$\varepsilon^{n+1} - \bar{\varepsilon} = \varepsilon^{\gamma+1} - \varepsilon^{\gamma} + \varepsilon^{\gamma} - \bar{\varepsilon} = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)^{\gamma} \Delta T + (\varepsilon^{\gamma} - \bar{\varepsilon}) \tag{16}$$

и потока тепла

$$\sum_f \left(\chi \frac{\partial T}{\partial n}\right)_f^{n+1} \Delta S_f = \sum_f \chi_f^{\gamma} \left(\frac{\partial \Delta T}{\partial n}\right)_f^{\gamma} \Delta S_f + \sum_f \chi_f^{\gamma} \left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_f^{\gamma} \Delta S_f, \tag{17}$$

где γ — номер итерации.

С учетом (16) и (17) уравнение (15) преобразуется к виду

$$\frac{1}{\tau^n} (\rho \Delta V)_P \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_P^{\gamma} \Delta T_P - \sum_f \chi_f^{\gamma} \left(\frac{\partial \Delta T}{\partial n}\right)_f \Delta S_f = -\frac{(\varepsilon_P^{\gamma} - \bar{\varepsilon}_p)}{\tau^n} (\rho \Delta V)_P + \sum_f \chi_f^{\gamma} \left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_f^{\gamma} \Delta S_f.$$

Поток тепла на гранях ячеек определяется из условия равенства односторонних потоков и непрерывности температуры в центре грани. На равномерной ортогональной сетке данная схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый порядок по времени.

Для построения аппроксимации потока тепла через внутреннюю грань рассмотрим произвольную f-ю грань, которая является общей для ячеек P и E (рис. 3). Обозначим как f также центр грани. Проведем через центры ячеек P и E линии, перпендикулярные нормальной линии к f-й грани. Определим точки P' и E' пересечения этих линий с нормальной прямой.

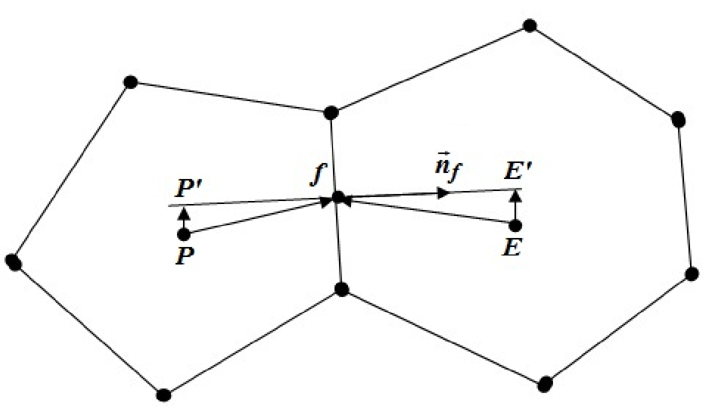

Рис. 3. Шаблон точек для аппроксимации $\chi\dfrac{\partial T}{\partial n}$ на внутренних гранях

Векторы $\Delta\vec{R}_{PP'}$ и $\Delta\vec{R}_{EE'}$ с учетом ориентации вектора нормали определяются по следующим формулам:

$$\Delta\vec{R}_{PP'} = \vec{R}_{P'} - \vec{R}_P = \Delta\vec{R}_{Pf} - \vec{n}_f\left(\vec{n}_f \cdot \Delta\vec{R}_{Pf}\right), \quad \Delta\vec{R}_{Pf} = \vec{R}_f - \vec{R}_P;$$
$$\Delta\vec{R}_{EE'} = \vec{R}_{E'} - \vec{R}_P = \Delta\vec{R}_{Ef} - \vec{n}_f\left(\vec{n}_f \cdot \Delta\vec{R}_{Ef}\right), \quad \Delta\vec{R}_{Ef} = \vec{R}_f - \vec{R}_E.$$

Считая, что в точках P', E' и центре грани f известны значения температуры, поток тепла в направлении нормали можно определить из условия его непрерывности:

$$\left(\chi\frac{\partial T}{\partial n}\right)_f = \chi_P\frac{T_f - T_{P'}}{\left|\Delta\vec{R}_{P'f}\right|} = \chi_E\frac{T_{E'} - T_f}{\left|\Delta\vec{R}_{E'f}\right|}. \tag{18}$$

Исключив из (18) значение температуры на грани (T_f), получим выражение для потока тепла через единичную поверхность:

$$\left(\chi\frac{\partial T}{\partial n}\right)_f \approx \chi_f\frac{T_{E'} - T_{P'}}{\left|\Delta\vec{R}_{E'f}\right| + \left|\Delta\vec{R}_{P'f}\right|}, \tag{19}$$

где значение коэффициента теплопроводности в центре грани χ_f определяется как среднее гармоническое значение:

$$\chi_f = \frac{\chi_P\chi_E\left(\left|\Delta\vec{R}_{P'f}\right| + \left|\Delta\vec{R}_{E'f}\right|\right)}{\chi_P\left|\Delta\vec{R}_{E'f}\right| + \chi_E\left|\Delta\vec{R}_{P'f}\right|}. \tag{20}$$

Значения $T_{P'}$ и $T_{E'}$ определяются с использованием grad T, вычисленного в центрах ячеек:

$$T_{P'}^{\gamma} = T_P^{\gamma} + (\mathrm{grad}\ T)_P^{\gamma} \cdot \Delta\vec{R}_{PP'}; \quad T_{E'}^{\gamma} = T_E^{\gamma} + (\mathrm{grad}\ T)_E^{\gamma} \cdot \Delta\vec{R}_{EE'}. \tag{21}$$

Подставив (21) в (19), получим окончательное выражение для потока тепла через внутреннюю грань:

$$\left(\chi\frac{\partial T}{\partial n}\right)_f^{\gamma}\Delta S_f = \lambda_f^{\gamma}\left(T_E^{\gamma} - T_P^{\gamma} + (\mathrm{grad}\ T)_E^{\gamma}\cdot\Delta\vec{R}_{EE'} - (\mathrm{grad}\ T)_P^{\gamma}\cdot\Delta\vec{R}_{PP'}\right),$$

где

$$\lambda_f = \frac{\chi_P\chi_E\Delta S_f}{\left|\Delta\vec{R}_{E'f}\right|\chi_P + \left|\Delta\vec{R}_{P'f}\right|\chi_E}. \tag{22}$$

Следуя построению явной аппроксимации потока тепла, приращение теплового потока представим следующим образом:

$$\left(\chi\frac{\partial\Delta T}{\partial n}\right)_f \approx \chi_f^{\gamma}\frac{\Delta T_{E'} - \Delta T_{P'}}{\left|\Delta\vec{R}_{P'E'}\right|}, \tag{23}$$

где значение коэффициента теплопроводности в центре грани χ_f определяется как среднее гармоническое значение (20), вычисленное по параметрам с предыдущей итерации.

При построении неявной аппроксимации для приращения потока тепла будем учитывать в (23) только главные члены разложения, полагая $\Delta T_{P'} = \Delta T_P$, $\Delta T_{E'} = \Delta T_E$. Тогда разностная аппроксимация для приращения потока тепла запишется в виде

$$\left(\chi\frac{\partial\Delta T}{\partial n}\right)_f\Delta S_f \approx \lambda_f^{\gamma}\left(\Delta T_E - \Delta T_P\right),$$

где коэффициент λ_f^{γ} определяется по формуле (22).

При таком способе определения приращения потока тепла матрица будет симметрической с диагональным преобладанием и шириной ленты, определяемой только числом граней. Граничные условия в этом случае разрешаются только в явном операторе. В частности, если по теплопроводности задано условие излучения абсолютно черного тела (6), то тепловой поток и температура на грани определяются локальными итерациями из следующей аппроксимации граничного условия:

$$\chi T_f^{\nu-1} \frac{T_f^\nu - T_P^\gamma - (\mathrm{grad}\ T)_P^\gamma \cdot \Delta \vec{R}_{PP'}}{\Delta \ell_{P'f}} = -\frac{\sigma c}{4} \left(T_f^\nu\right)^4,$$

где ν — номер локальной итерации.

Решение системы линейных алгебраических уравнений осуществляется с использованием решателей из библиотеки PMLP [5]. Сходимость итераций определяется в ячейках, в которых выполняется условие $T_P^\gamma > 10^{-5}$. Итерации ведутся до тех пор, пока не выполнится условие $\left|T_P^{\gamma+1} - T_P^\gamma\right| \le \varepsilon_1 T_P^\gamma + \varepsilon_2 \left(\varepsilon_1 < 10^{-4}, \varepsilon_2 < 10^{-8}\right)$ во всех ячейках разностной сетки.

Распараллеливание вычислений

Для проведения параллельного расчета проводится декомпозиция расчетной модели на заданное число процессоров. При этом каждая ячейка расчетной сетки отображается на конкретный процессор и выстраивается топология обменов значениями расчетных величин в ячейках между процессорами. Общепринятым подходом в случае декомпозиции неструктурированной многоугольной сетки считается ее отображение тем или иным образом на неориентированный граф. В данной работе применяется развитый аппарат теории графов для разбиения полученного графа за заданное число частей [13, 14], а для декомпозиции расчетной модели по процессорам используются возможности пакета Chaco [15].

После декомпозиции расчетной модели по процессорам для каждого фрагмента сетки формируются обменные слои ячеек. Обменными являются ячейки, не принадлежащие текущему процессору, но имеющие хотя бы один общий узел с рассчитываемыми на нем счетными ячейками (рис. 4).

В конце каждого расчетного этапа выполняется обмен данными между процессорами: расчетные данные из счетных ячеек текущего процессора пересылаются в обменные слои соседних, и соответственно происходит прием данных соседними процессорами. Для расчета деформации сетки на всех процессорах формируются массивы смещения границ регионов.

Межпроцессорное взаимодействие осуществляется с помощью асинхронных функций библиотеки MPI — *MPI_Irecv*, *MPI_Isend*.

По завершении расчетного шага выполняются коллективные операции при вычислении невязок решения, расчете интегральных величин и определении расчетного шага по времени.

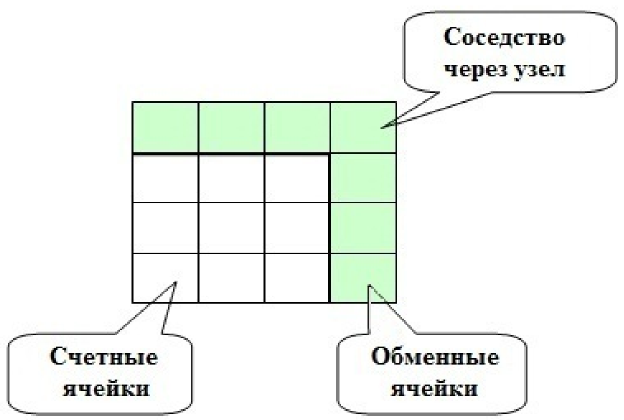

Рис. 4. Схема формирования обменных слоев

Результаты расчетов

Сходящаяся сферическая УВ. Рассматривается задача о схождении сферической автомодельной УВ и последующем отражении ее от центра [7, тест № 5]. В шаре радиусом $R_0 = 1$ заданы начальная плотность $\rho_0 = 1$ и начальная внутренняя энергия $E_0 = 0$. Уравнение состояния — для идеального газа с $\gamma = 5/3$. На внешней границе задана зависимость давления от времени $P(t)$.

Для проведения расчетов на сходимость были построены три сгущающиеся расчетные сетки. В центральной области $R < 0{,}2$ строилась неструктурированная сетка, во внешней области $0{,}2 \le R \le$

$\leq R_0$ — лучевая сетка с числом ячеек 20×24, 40×48 и 60×96. Расчет проводился в осесимметричной постановке.

На рис. 5 показано распределение давления на самой подробной сетке на момент времени $t = 0{,}59$, который близок к моменту фокусировки УВ.

На рис. 6 показаны распределения давления и модуля скорости вдоль радиуса, полученные на последовательно сгущающихся сетках, в сравнении с точным решением на момент времени $t = 0{,}59$.

В табл. 1 сравниваются точные значения моментов фокусировки и выхода отраженной УВ на свободную поверхность с расчетными значениями, полученными на сгущающихся сетках. Для самой подробной сетки разница с точным решением не превышает $\Delta \approx 0{,}9\,\%$ на момент фокусировки УВ и $\Delta \approx 0{,}1\%$ на момент выхода отраженной УВ на свободную поверхность.

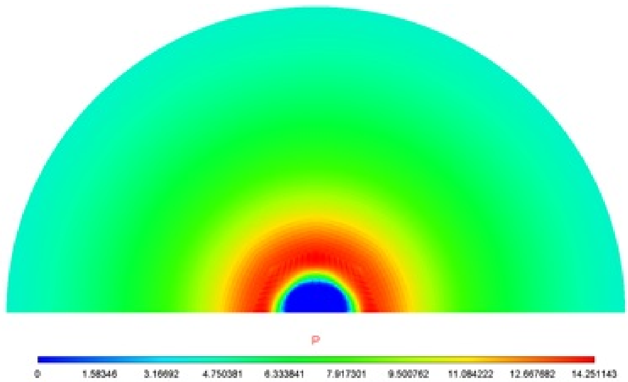

Рис. 5. Распределение давления на момент времени $t = 0{,}59$ на самой подробной сетке

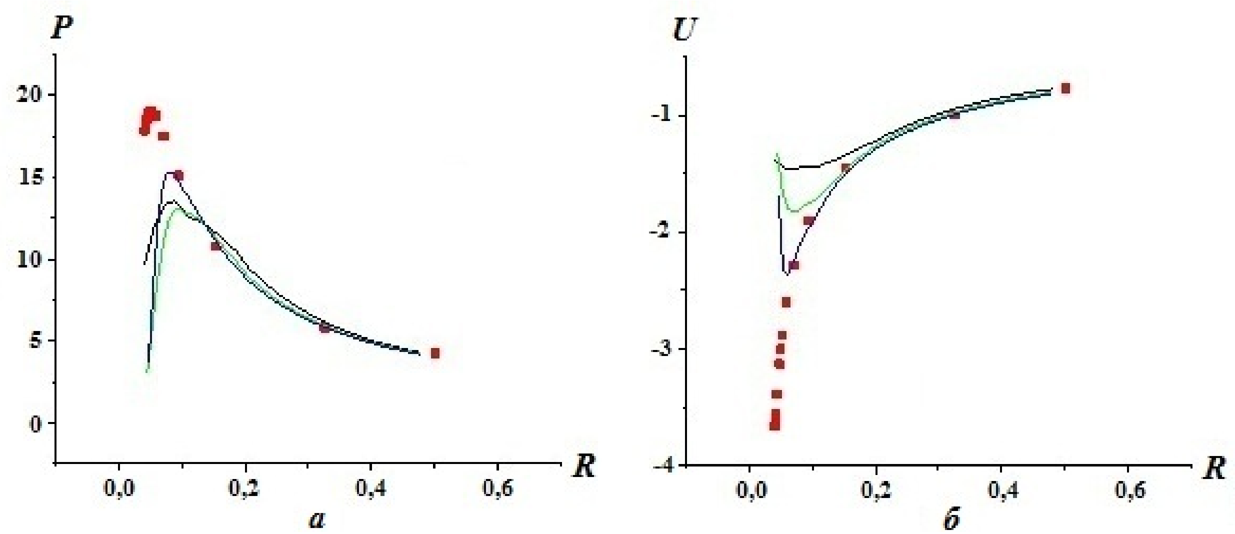

Рис. 6. Распределения давления (*а*) и модуля скорости (*б*) на момент времени $t = 0{,}59$ на сгущающихся сетках в сравнении с точным решением: ■ — точное решение; —— — сетка 30×24; —— — сетка 60×48; —— — сетка 120×96

Таблица 1

Точные и расчетные значения моментов фокусировки и выхода отраженной УВ на свободную поверхность

Момент времени	Точное значение	Сетка 30×24	Сетка 60×48	Сетка 120×96
Фокусировка УВ	0,5958	0,6037; $\Delta\approx1{,}3\,\%$	0,6035; $\Delta\approx1{,}3\,\%$	0,6013; $\Delta\approx0{,}9\,\%$
Выход УВ на границу	0,7895	0,7907; $\Delta\approx0{,}2\,\%$	0,7907; $\Delta\approx0{,}2\,\%$	0,7902; $\Delta\approx0{,}1\,\%$

Точечный взрыв. Рассматривается задача о сферически-симметричном движении газа, возникающем в результате взрыва в однородном веществе без противодавления [7, тест № 4]. В шаре радиусом $R_{01} = 0{,}1$ задана начальная внутренняя энергия $E_{01} = 10^7$, в сферическом слое $0{,}1 \leq R \leq 0{,}2$ $E_{02} = 0$. Начальная плотность в обеих областях $\rho_0 = 1$. Уравнение состояния — для идеального газа с $\gamma = 1{,}4$. Закон движения фронта УВ описывается соотношением [16] $R(t) = \alpha\,(E_{\text{в}}/\rho_0)^{1/5}\, t^{2/5}$, где $E_{\text{в}} = 4/3\pi R_0^3 \rho_0 E_{01} = 4{,}189 \cdot 10^4$ — энергия взрыва; α — константа, равная 1,0328 для случая $\gamma = 1{,}4$.

Для проведения расчетов на сходимость были построены три сгущающиеся расчетные сетки. В центральной области $R < 0{,}1$ строилась неструктурированная сетка, во внешней области $0{,}1 < R <$ $< 0{,}2$ — лучевая сетка с числом ячеек 90×16, 180×32 и 360×64. На рис. 7 показаны распределения газодинамических величин на самой подробной сетке на момент времени $t = 3{,}5$, когда УВ прошла примерно 140 начальных радиусов R_{01}.

В табл. 2 сравниваются расчетные значения полной энергии (E_{tot}) и величины R^5/t^2 (должна сохраняться при автомодельном течении) на начальный ($t = 0$) и конечный ($t = 9$) моменты времени. На момент времени $t = 9$ УВ прошла примерно 200 начальных радиусов R_{01}. Из табл. 2 видно, что на сетке 250×96 величины сохраняются с точностью $\approx 0{,}8\,\%$.

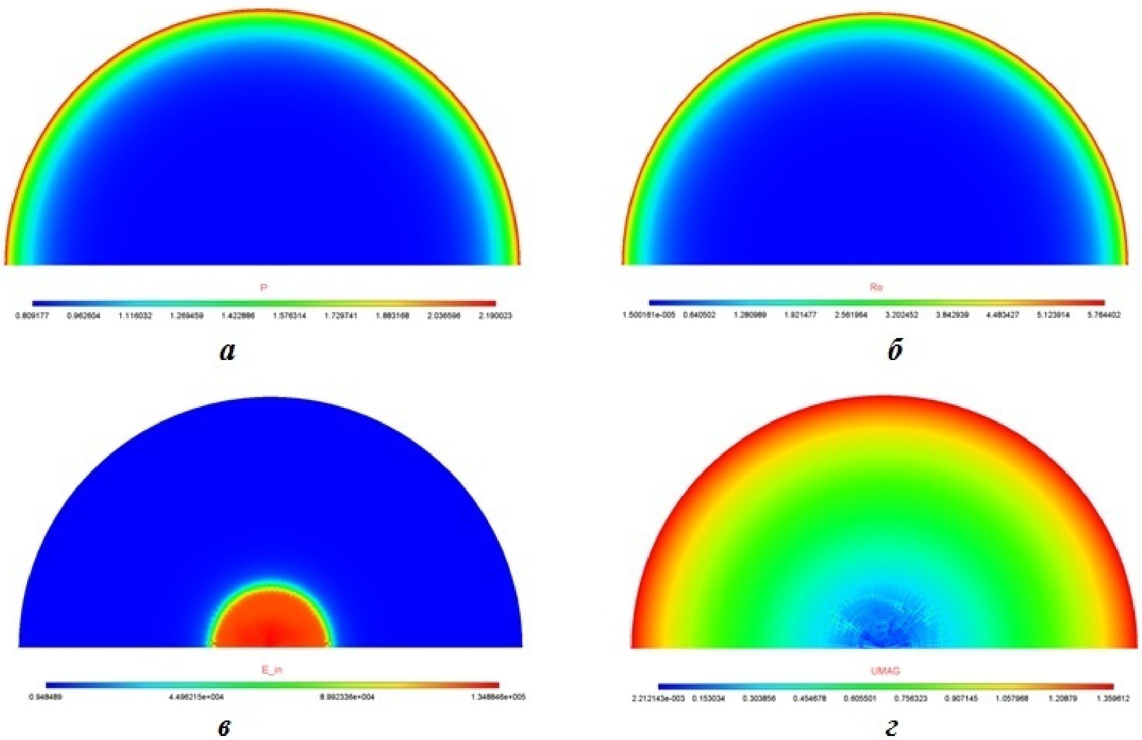

Рис. 7. Распределения давления (*а*), плотности (*б*), внутренней энергии (*в*) и модуля скорости (*г*) на самой подробной сетке на момент времени $t = 3{,}5$

Таблица 2

Расчетные значения полной энергии (E_{tot}) и величины R^5/t^2 на моменты времени $t = 0$ и $t = 9$ (сетка 250×96)

Время и радиус	E_{tot}	R^5/t^2
$t = 0$; $R = R_{01}$	$6{,}61 \cdot 10^3$	$4{,}83 \cdot 10^4$
$t = 9$; $R \approx 200R_{01}$	$6{,}56 \cdot 10^3$	$4{,}81 \cdot 10^4$
Точность, %	$\approx 0{,}8$	$\approx 0{,}8$

Радиус фронта УВ на момент времени $t = 9$ на экваторе $R_э = 20{,}95$, на полюсе $R_п = 20{,}93$. Погрешность в определении радиуса фронта УВ $\Delta \approx 0{,}09\,\%$.

Изменение формы фронта УВ от времени для сферической гармоники Y8,0. Рассматривается сферическая область с радиусом $R_0 = 1$. В начальный момент времени на поверхности области задаются возмущения в виде сферической гармоники Y8,0. В качестве начальных данных задаются расчетные поля задачи о распространении УВ от точечного взрыва ($\rho_0 = 1$; $E_0 = 10^7$; $\gamma = 1{,}4$) на момент выхода решения на автомодельный режим. На рис. 8 показано изменение фронта УВ за период. На месте впадин образуются "холмы" (1/2 периода), затем на месте холмов опять образуются впадины (период). Амплитуда возмущений для наглядности увеличена в 3 раза.

На рис. 9 показана нормированная зависимость амплитуды возмущений от логарифма среднего радиуса в сравнении с аналитическим решением.

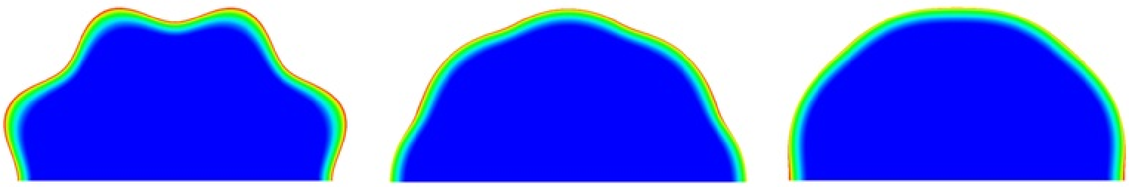

Рис. 8. Изменение фронта УВ за период

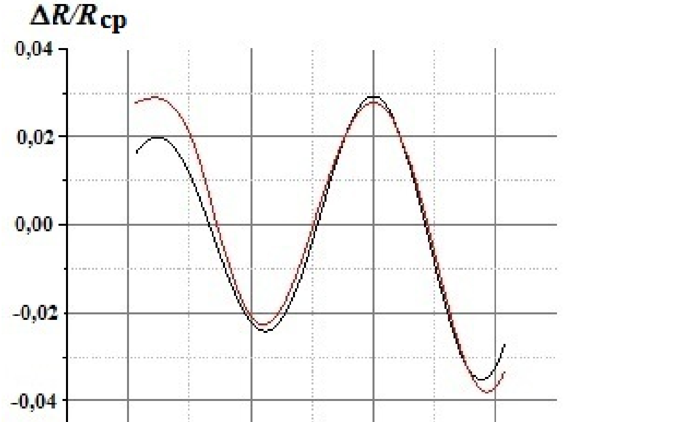

Рис. 9. Нормированная зависимость амплитуды возмущений от логарифма среднего радиуса: —— — расчет; —— — точное решение

Задача об остывании бесконечного бруса с квадратным сечением. Рассматривается задача об остывании бесконечного бруса с квадратным сечением [8], внутри которого в начальный момент времени задана температура $T_0 = 1$, а на внешней границе во все последующие моменты времени поддерживается нулевая граничная температура $T_{bound} = 0$. Сечение бруса представляет собой единичный квадрат. Точное решение имеет вид [17]

$$T(x, y, t) = \psi(x, t)\psi(y, t),$$

где $\psi(x,t) = \dfrac{4}{\pi}\displaystyle\sum_{k=0}^{\infty} \dfrac{e^{-\pi^2(2k+1)^2 t}}{2k+1} \sin \pi(2k+1)x.$

Для проведения расчетов на сходимость были построены три сгущающиеся четырехугольные сетки с числом ячеек 20×20, 40×40, 80×80 и три сгущающиеся треугольные сетки с числом ячеек 440, 1 814, 7 746. На рис. 10, 11 показаны зависимости температуры от длины вдоль прямой $y = x$ в сечении бруса на момент времени $t = 0{,}1$ для расчетов на сгущающихся четырехугольных и треугольных сетках в сравнении с аналитическим решением. Погрешность решения на самых грубых сетках не превышает $\approx 0{,}7\,\%$.

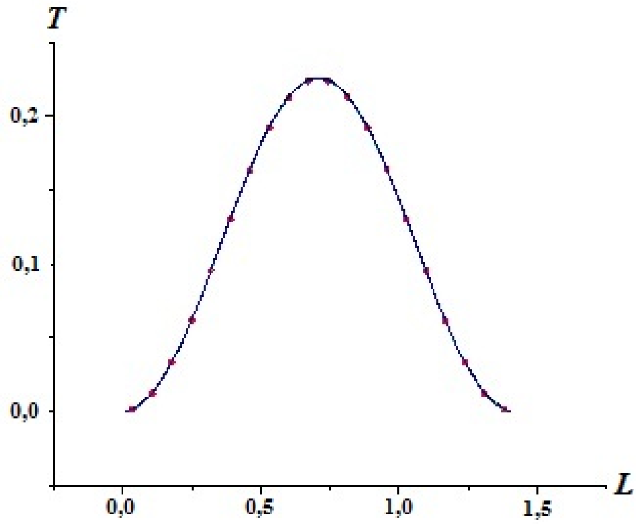

Рис. 10. Зависимость температуры от длины вдоль прямой $y = x$ в сечении бруса на момент времени $t = 0{,}1$ для расчетов на сгущающихся четырехугольных сетках в сравнении с аналитическим решением: • — точное решение; ─── — сетка 20×20; ─── — сетка 40×40; ─── — сетка 80×80

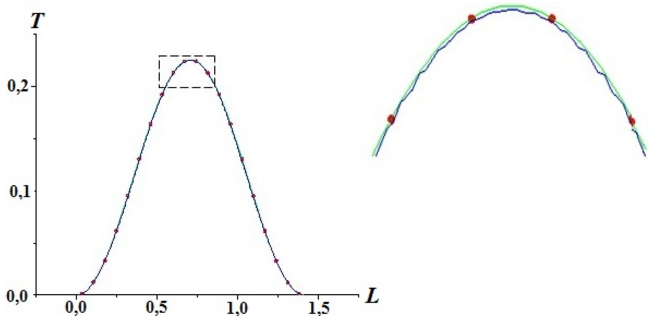

Рис. 11. Зависимость температуры от длины вдоль прямой $y = x$ в сечении бруса на момент времени $t = 0{,}1$ для расчетов на самой подробной четырехугольной и треугольной сетках в сравнении с аналитическим решением: • — точное решение; ─── — квадратная сетка 80×80; ─── — треугольная сетка 7 746 ячеек

Распространение тепла от постояннодействующего источника. Рассматривается задача распространения сферической тепловой волны от постоянного действующего источника $Q(t, T) = \frac{3}{2}\frac{T}{t}$. Уравнение состояния $\varepsilon = c_v T$, $c_v = 1$. Коэффициент теплопроводности $\chi = T^{\sigma}$, $\sigma = 4$. Плотность среды $\rho = 1$. Аналитическое решение данной задачи имеет следующий вид [18]:

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

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

Задача решается в осесимметричной постановке. В области, представляющей собой квадрат $0 \le z, r \le 2{,}5$, задана начальная температура $T_0 = 1{,}1629541$; во внешней области температура равна нулю. Строятся три сгущающиеся четырехугольные сетки с числом ячеек 25×20, 50×40, 100×80. Расчеты проводятся до момента времени $t = 1{,}5$. На рис. 12 показано распределение температуры вдоль оси Or. Разница между точным и расчетным значениями на подробной сетке не превышает $\approx 0{,}7\,\%$.

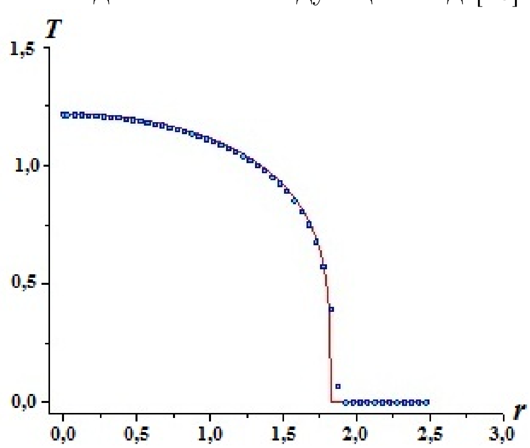

Рис. 12. Графики распределения температуры вдоль оси: ─── — точное решение; ■ — расчет на сетке 25×20

Заключение

Разработана методика параллельного расчета двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью на подвижной неструктурированной сетке. Методика основана на расщеплении по физическим процессам, методе контрольного объема для аппроксимации исходных уравнений, явном методе интегрирования по времени уравнений газовой динамики и неявном методе интегрирования уравнения теплопроводности. Для решения уравнения теплопроводности построена схема относительно приращения температуры. Получающаяся в результате аппроксимации система линейных алгебраических уравнений решается с использованием параллельных решателей PMLP. Выполнен ряд тестовых расчетов, подтверждающих работоспособность методики. Показано хорошее согласие численных решений с аналитическими.

Список литературы

1. *Броуд Г.* Механика. № 3. Расчеты взрывов на ЭВМ. Подземные взрывы. М.: Мир, 1975.
Broud G. Mekhanika. № 3. Raschety vzryvov na EVM. Podzemnye vzryvy. M.: Mir, 1975.

2. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
Zeldovich Ya. B., Rayzer Yu. P. Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy. M.: Nauka, 1966.

3. *Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
Godunov S. K., Zabrodin A. V., Ivanov M. Ya., Krayko A. N., Prokopov G. P. Chislennoe reshenie mnogomernykh zadach gazovoy dinamiki. M.: Nauka, 1976.

4. *Матяш С. В.* Новый метод использования принципа минимальных приращений в численных схемах второго порядка аппроксимации // Ученые записки ЦАГИ. 2005. Т. 36, № 3—4. С. 42—50.
Matyash S. V. Novy metod ispolzovaniya printsipa minimalnykh prirashcheniy v chislennykh skhemakh vtorogo poryadka approksimatsii // Uchenye zapiski TsAGI. 2005. T. 36, № 3—4. S. 42—50.

5. *Бартенев Ю. Г., Ерзунов В. А., Карпов А. П., Петров Д. А., Пищулин И. А., Стаканов А. Н., Щаникова Е. Б., Капорин И. Е., Милюкова О. Ю., Харченко С. А., Коньшин И. Н., Сысоев А. В., Мееров И. Б.* Комплекс библиотек параллельных решателей СЛАУ LParSol версии 3 // Сб. докл. XV межд. конф. "Супервычисления и математическое моделирование". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2014. С. 102—110.
Bartenev Yu. G., Erzunov V. A., Karpov A. P., Petrov D. A., Pishchulin I. A., Stakanov A. N., Shchanikova E. B., Kaporin I. E., Milyukova O. Yu., Kharchenko S. A., Konshin I. N., Sysoev A. V., Meerov I. B. Kompleks bibliotek parallelnykh reshateley SLAU LParSol versii 3 // Sb. dokl. XV mezhd. konf. "Supervychysleniya i matematicheskoe modelirovanie". Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2014. S. 102—110.

6. *Дерюгин Ю. Н., Козелков А. С., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В., Шагалиев Р. М.* Многофункциональный высокопараллельный пакет программ ЛОГОС для решения задач тепломассопереноса и прочности // Сб. тез. докл. Санкт-Петербургского науч. форума "Наука и общество". С.-Пб., 2012. С. 102.
Deryugin Yu. N., Kozelkov A. S., Spiridonov V. F., Tsiberev K. V., Shagaliev R. M. Mnogofunktsionalny vysokoparallelny paket programm LOGOS dlya resheniya zadach teplomassoperenosa i prochnosti // Sb. tez. dokl. Sankt-Peterburgskogo nauch. foruma "Nauka i obshchestvo". S-Pb.: 2012. S. 102.

7. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И., Зубов Е. Н., Ковалёв Н. П., Соколов С. С., Шемарулин В. Е.* Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 1. Требование к тестам. Тесты 1—7 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 3—9.

Bondarenko Yu. A., Voronin B. L., Delov V. I., Zubov E. N., Kovalev N. P., Sokolov S. S., Shemarulin V. E. Opisanie sistemy testov dlya dvumernykh gazodinamicheskikh metodik i programm. Ch. 1. Trebovaniya k testam. Testy 1-7 // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1991. Vyp. 2. S. 3—9.

8. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И., Зубов Е. Н., Ковалёв Н. П., Соколов С. С., Шемарулин В. Е.* Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 2. Требование к тестам. Тесты 8—15 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 10—14.
   Bondarenko Yu. A., Voronin B. L., Delov V. I., Zubov E. N., Kovalev N. P., Sokolov S. S., Shemarulin V. E. Opisanie sistemy testov dlya dvumernykh gazodinamicheskikh metodik i programm. Ch. 2. Trebovaniya k testam. Testy 8-15 // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1991. Vyp. 2. S. 10—14.

9. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Горев В. В., Делов В. И., Зубов Е. Н., Матвеев Ю. М., Моренко А. И., Соколов С. С., Шемарулин В. Е.* Описание системы тестов для методик и программ, предназначенных для решения двумерных задач теплопроводности // Там же. 1992. Вып. 2. С. 14—20.
   Bondarenko Yu. A., Voronin B. L., Gorev V. V., Delov V. I., Zubov E. N., Matveev Yu. M., Morenko A. I., Sokolov S. S., Shemarulin V. E. Opisanie sistemy testov dlya metodik i programm, prednaznachennykh dlya resheniya dvumernykh zadach teploprovodnosti // Tam zhe. 1992. Vyp. 2. S. 14—20.

10. *Luke E., Collins E., Blades E.* A fast mesh deformation method using explicit interpolation // J. Comp. Phys. 2012. Vol. 231. P. 586—601.

11. *Колган В. П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1972. Т. 3, № 6. С. 68—77.
    Kolgan V. P. Primenenie printsipa minimalnykh znacheniy proizvodnoy k postroeniyu konechno raznostnykh skhem dlya rascheta vzryvnykh resheniy gazovoy dinamiki // Uchenye zapiski TsAGI. 1972. T. 3, № 6. S. 68—77.

12. *Hirsch Ch.* Numerical Computation of Internal & External Flows. V. 2. Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows. Wiley series in numerical methods in engineering, A Wiley-Interscience publication, 1988.

13. *Якобовский М. В.* Обработка сеточных данных на распределенных вычислительных системах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 2. С. 40—53.
    Yakobovskiy M. V. Obrabotka setochnykh dannykh na raspredelennykh vychislitelnykh sistemakh // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2004. Vyp. 2. S. 40—53.

14. *Евстигнеев В. А.* Применение теории графов в программировании / Под ред. А. П. Ершова. М.: Наука, 1985.
    Evstigneev V. A. Primenenie teorii grafov v programmirovanii / Pod red. A. P. Ershova. M.: Nauka, 1985.

15. *Hendrickson B., Leland R.* The Chaco User's Guide: Version 2.0: Tech. Rep. SAND95-2344. Sandia National Laboratories, 1995.

16. *Седов А. И.* Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1972.
    Sedov A. I. Metody podobiya i razmernosti v mekhanike. M.: Nauka, 1972.

17. *Кошляков Н. С.,Глинер Э. Б., Смирнов М. М.* Уравнения в частных производных математической физики. М.: Высшая школа, 1970.
    Koshlyakov N. S., Gliner E. B., Smirnov M. M. Uravneniya v chastnykh proizvodnykh matematicheskoy fiziki. M.: Vysshaya shkola, 1970.

18. *Тихомиров Б. П.* Автомодельные тепловые волны от сосредоточенного или объемного источника в среде с неоднородными теплофизическими параметрами // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 2. С. 40—50.
Tikhomirov B. P. Avtomodelnye teplovye volny ot sosredotochennogo ili obyemnogo istochnika v srede s neodnorodnymi teplofizicheskimi parametrami // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2010. Vyp. 2. S. 40—50.

Статья поступила в редакцию 07.04.21.

УДК 625.033.37

МОДЕЛЬ ДЕФОРМИРУЕМОСТИ ГРУНТОВОГО ОСНОВАНИЯ ЖЕЛЕЗНОДОРОЖНОГО ПУТИ ПРИ ПРОПУСКЕ БОЛЬШОГО КОЛИЧЕСТВА ПОЕЗДОВ С РАЗЛИЧНОЙ НАГРУЗКОЙ

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

Проведено исследование применимости модели стандартного линейного твердого тела к описанию деформации земляного полотна под поездной нагрузкой. Ранее было показано, что в частном случае циклической синусоидальной нагрузки на рельс модель стандартного линейного твердого тела хорошо описывает как деформацию грунта под нагрузкой, так и релаксацию грунта после снятия нагрузки. В настоящей работе проанализированы экспериментальные данные, полученные сотрудниками ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро. Модель стандартного линейного твердого тела обобщена на случай произвольного вида функции нагрузки. Доказана применимость этой модели при неоднородной по глубине нагрузке. Предложены простые оценочные формулы для деформации грунта при прохождении одного или нескольких поездов в зависимости от количества и массы проходящих составов, а также релаксации пути после прохождения поезда. Полученная методика позволяет прогнозировать рост динамических отступлений в вертикальной плоскости при прохождении длинносоставных поездов, что необходимо для планирования выправочных работ.

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

Введение

В последнее время на железных дорогах наблюдается все большее усложнение перевозочной работы из-за недостаточной пропускной способности ряда направлений в сочетании с ростом осевых нагрузок и весов поездов. Обеспечение безопасного и бесперебойного движения поездов с установленными скоростями в таких условиях требует постоянного совершенствования системы технического обслуживания пути. Одним из важнейших элементов этой системы является прогноз изменения состояния пути и, в частности, скорости роста неровностей в вертикальной продольной плоскости. Информация по этому вопросу является необходимой для определения потребности в проведении выправочных работ.

Для получения прогнозов состояния пути требуются методики, позволяющие вычислить скорость роста амплитуд неровностей в вертикальной продольной плоскости в зависимости от конструкции верхнего строения пути, характеристик подбалластного основания и уровня нагруженности пути поездной нагрузкой. Помимо методик, основанных на обработке статистических данных о наличии и параметрах неровностей в различных условиях эксплуатации с построением вероятностных моделей по ансамблю данных с различных участков, несомненный интерес представляют детерминированные расчеты на базе математического моделирования физических процессов, приводящих к развитию неровностей. Одним из направлений инновационного развития железнодорожного транспорта является математическое моделирование процесса жизненного цикла эталонной конструкции пути с учетом динамического воздействия поездной нагрузки.

В работах [1, 2] были проанализированы реологические модели вязкоупругого тела, пригодные для описания поведения грунта, обладающего вязкоупругими свойствами. Из этих моделей были получены решения для случая, когда функция нагрузки имеет вид синусоиды. На примере экспериментальных работ ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро для длинносоставных поездов [2] было показано, что модель стандартного линейного твердого тела корректно описывает релаксацию пути после снятия поездной нагрузки.

В настоящей работе модель обобщена на случай произвольного вида функции нагрузки. Получены простые оценочные формулы для зависимости осадки пути от количества и массы проходящих составов.

Математическая модель

На рис. 1 приведена схема модели стандартного линейного твердого тела, предложенной для описания деформации вязкоупругого грунта в работах [1, 2].

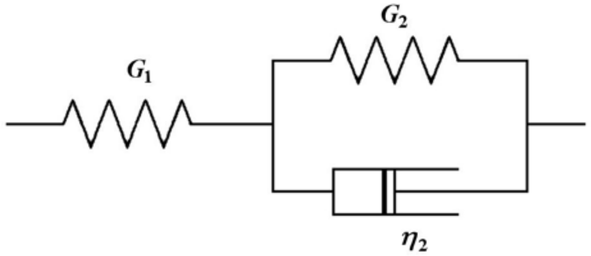

Рис. 1. Модель стандартного линейного твердого тела (G_1, G_2 — упругие элементы; η_2 — вязкий элемент)

Согласно [3] уравнение для модели стандартного твердого тела имеет вид

$$\frac{d\varepsilon}{dt} + \tau_2\varepsilon = \frac{G_1 + G_2}{G_1\eta_2}\sigma + \frac{1}{G_1}\frac{d\sigma}{dt}, \qquad (1)$$

где $\sigma(t)$ — функция, задающая поездную нагрузку на шпалу от времени; ε — относительная деформация, вызываемая нагрузкой $\sigma(t)$; G_1 и G_2 — модули упругости; η_2 — вязкость; $\tau_2 = G_2/\eta_2$.

В уравнении модели учитывается только поездная нагрузка на грунтовое основание пути; поскольку вес грунта, а также вес рельсов и шпал постоянны, то деформация грунтового основания под воздействием веса грунта и верхнего строения пути присутствует всегда и является постоянной величиной. Фактически нагрузка при прохождении поезда добавляется к имеющейся и вызывает дополнительную деформацию грунтового основания, которая обозначена как $\varepsilon(t)$.

В работах [1, 2] было показано, что для случая, когда нагрузка на рельсы описывается синусоидальной функцией, предложенная модель корректно описывает релаксацию пути после снятия поездной нагрузки.

Рассмотрим общий случай, когда функция нагрузки на шпалу не представляется синусоидой. Пусть поезд проходит над шпалой за время T, тогда функция нагрузки $\sigma(t) \neq 0$ при $t \leq T$, и $\sigma(t) = 0$ при $t > T$.

Решение уравнения (1) имеет вид

$$\varepsilon(t) = \exp(-\tau_2 t) \int_0^t F(t') \exp(\tau_2 t')\, dt', \qquad (2)$$

где

$$F(t) = \begin{cases} \dfrac{G_1 + G_2}{G_1\eta_2}\sigma + \dfrac{1}{G_1}\dfrac{d\sigma}{dt} & \text{при} \quad t \leq T; \\ 0 & \text{при} \quad t > T. \end{cases} \qquad (3)$$

Решение уравнения (1) с учетом (3) принимает вид

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \exp(-\tau_2 t)\,\dfrac{1}{\eta_2}\displaystyle\int_0^t \sigma(t')\exp(\tau_2 t')\,dt' + \dfrac{1}{G_1}\Big(\sigma(t) - \sigma(0)\exp(-\tau_2 t)\Big) & \text{при} \quad t \leq T; \\ \varepsilon_T \exp(-\tau_2 t) & \text{при} \quad t > T, \end{cases} \qquad (4)$$

где $\varepsilon_T = \dfrac{1}{\eta_2}\int\limits_0^T \sigma(t')\exp(\tau_2 t')\,dt'$ — остаточная деформация грунта в момент после прохождения поезда.

На рис. 2 приведена временная зависимость осадки грунта, полученная с помощью численного решения уравнения (1). Для сравнения приведены экспериментальные значения осадки уровня головки рельса (УГР), полученные во ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро для длинносоставных поездов [2] в предположении, что осадка УГР соответствует осадке земляного полотна. В расчете был смоделирован поезд из 30 одинаковых вагонов, для каждого из которых функция нагрузки имела вид, показанный на рис. 3. Поезд двигался со скоростью 40 км/ч. Параметры вязкоупругой модели для расчетов: $G_1 = 40$ МПа; $G_2 = 6{,}2$ МПа; $\eta_2 = 2$ ГПа·с.

Пусть поезд состоит из N_V одинаковых вагонов, тогда каждый вагон проходит над шпалой за время $T_1 = T/N_V$. В этом случае $\sigma(t)$ будет периодической функцией с периодом T_1. Тогда величину $I(t) = \int\limits_0^t \sigma(t')\exp(\tau_2 t')\,dt'$ из верхней строки выражения (4) можно записать в виде

$$I(t) = \sum_{k=1}^{n(t)} \int\limits_{T_1(k-1)}^{T_1 k} \sigma(t')\exp(\tau_2 t')\,dt',$$

где $n(t)$ — количество вагонов, прошедших над шпалой за время t.

В каждом интеграле делаем замену $t' = \xi + (k-1)T_1$ и, учитывая, что в рассматриваемых условиях $\tau_2 T_1$ мало, а, значит, экспонента слабо меняется за период T_1 и ее можно приближенно считать равной константе на каждом периоде прохождения одного вагона, получаем

$$I(t) = \sum_{k=1}^{n(t)} \exp\Big(\tau_2\left[\xi^* + (k-1)T_1\right]\Big)\int\limits_0^{T_1} \sigma(t')\,dt,$$

где ξ^* — некоторое значение в интервале $[0,\ T_1)$.

Перепишем

$$I(t) = S(t)\int\limits_0^{T_1} \sigma(t')\,dt',$$

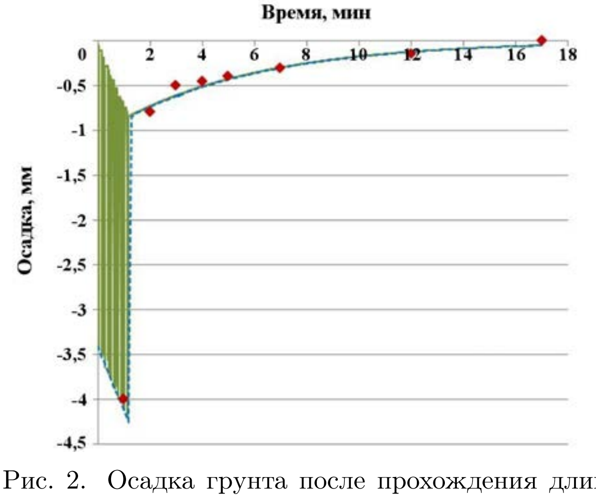

Рис. 2. Осадка грунта после прохождения длинносоставного поезда, полученная при численном (——) и приближенном полуаналитическом (- - -) решении уравнения модели стандартного твердого тела (1), а также экспериментальные данные из работы [2] (♦)

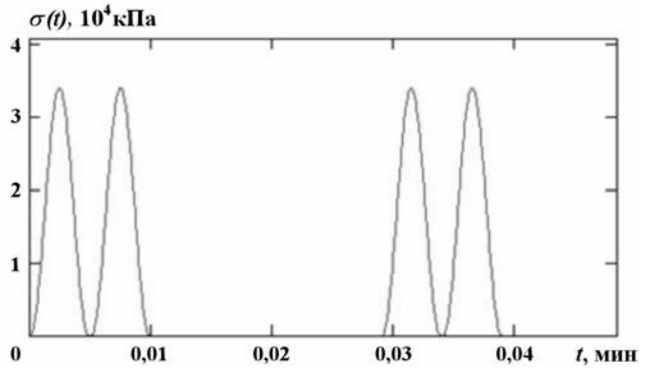

Рис. 3. Вид функции нагрузки на грунт при прохождении одного вагона с четырьмя осями со скоростью 40 км/ч

где

$$S(t) = \sum_{k=1}^{n(t)} \exp\Big(\tau_2\left[\xi^* + (k-1)\,T_1\right]\Big) \approx \frac{1}{T_1}\int_0^t \exp\left(\tau_2 t'\right) dt' = \frac{1}{T_1}\frac{1}{\tau_2}\Big(\exp\left(\tau_2 t\right) - 1\Big).$$

Тогда

$$I(t) = \frac{1}{\tau_2}\Big(\exp\left(\tau_2 t\right) - 1\Big)\left\langle\sigma\right\rangle,$$

где $\left\langle\sigma\right\rangle = \dfrac{1}{T_1}\int_0^{T_1} \sigma\left(t'\right) dt'$ — средняя по времени интегральная нагрузка на грунт при прохождении одного вагона.

Отсюда выражение (4) можно приближенно записать в виде

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \dfrac{1}{G_2}\Big(1 - \exp\left(-\tau_2 t\right)\Big)\left\langle\sigma\right\rangle + \dfrac{1}{G_1}\Big(\sigma(t) - \sigma(0)\exp\left(-\tau_2 t\right)\Big) & \text{при} \quad t \le T; \\ \varepsilon_T^0 \exp\Big(-\tau_2\left(t - T\right)\Big) & \text{при} \quad t > T, \end{cases} \tag{5}$$

где

$$\varepsilon_T^0 = \frac{1}{G_2}\Big(1 - \exp\left(-\tau_2 T\right)\Big)\left\langle\sigma\right\rangle - \tag{6}$$

остаточная деформация грунта в момент после прохождения поезда.

В выражении (5) второе слагаемое в верхней строке, пропорциональное $1/G_1$, отвечает за упругую деформацию грунта, которая проходит мгновенно после снятия нагрузки. Первое слагаемое отвечает за вязкоупругую деформацию, которая остается после прохождения поезда и для релаксации которой требуется значительное время.

Из рис. 2 видно, что деформация грунта $\varepsilon(t)$ во время прохождения поезда является быстро осциллирующей функцией (изменяется так же, как $\sigma(t)$, с $T_1 \ll T$), а после прохождения поезда $\varepsilon(t)$ меняется плавно по экспоненциальному закону. Для практических расчетов быстроизменяющуюся часть функции $\varepsilon(t)$ можно заменить на огибающую функцию максимального прогиба грунта под вагонами, не учитывающую осцилляции функции нагрузки под каждой осью:

$$\varepsilon_{\max}(t) = \begin{cases} \dfrac{1}{G_2}\Big(1 - \exp\left(-\tau_2 t\right)\Big)\left\langle\sigma\right\rangle + \dfrac{\sigma_0}{G_1} & \text{при} \quad t \le T; \\ \varepsilon_T^0 \exp\Big(-\tau_2\left(t - T\right)\Big) & \text{при} \quad t > T. \end{cases} \tag{7}$$

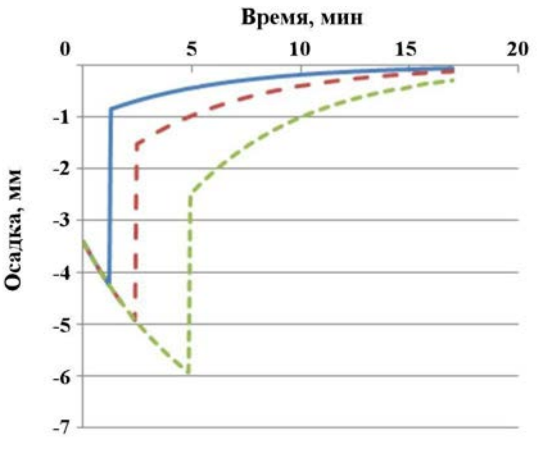

Рис. 4. Сравнение осадки грунта при прохождении поезда со скоростями 40 (——), 20 (- - -) и 10 км/ч (- - - -)

Здесь быстроосциллирующая функция нагрузки $\sigma(t)$ заменена на σ_0 — максимальное значение функции $\sigma(t)$ за время прохождения одного вагона. Огибающая функция $\varepsilon_{\max}(t)$ показана на рис. 2 пунктирной линией.

Из выражения (7) видно, что остаточная деформация грунта после прохождения поезда зависит от времени прохождения поезда и средней интегральной нагрузки $\left\langle\sigma\right\rangle$. От конкретного профиля функции $\sigma(t)$ остаточная деформация не зависит.

На рис. 4 приведены графики осадки грунта под одинаковыми поездами, двигающимися с разными скоростями: 40, 20, 10 км/ч. Видно, что при одной и той же массе поезда осадка пути увеличивается при уменьшении скорости поезда, т. е. при увеличении продолжительности нагрузки на грунт.

Случай воздействия нескольких поездов

Рассмотрим случай, когда с некоторым интервалом времени проходят несколько поездов. Если этот интервал меньше времени релаксации грунта, то следующий поезд попадает на уже деформированный грунт и увеличивает деформацию.

В случае прохождения нескольких поездов выражение (7) примет вид

$$\varepsilon_{\max}(t) = \begin{cases} S_k \exp\left(\tau_2 \left[T + D(k-1) - t\right]\right) + f(t - Dk), & Dk < t < Dk + T; \\ S_{k+1} \exp\left(\tau_2 \left(T + Dk - t\right)\right), & Dk + T < t < D(k+1). \end{cases} \tag{8}$$

Здесь D — временной интервал между поездами; T — время прохождения поезда, т. е. время релаксации грунта между поездами равно $dt = D - T$; $f(t) = \dfrac{\sigma_0}{G_1} + \dfrac{\langle\sigma\rangle}{G_2}\left(1 - \exp(-\tau_2 t)\right)$ — функция, описывающая воздействие на грунт поезда, проходящего над участком грунта в данный момент t; S_k — остаточная деформация после прохождения k-го поезда:

$$S_k = \begin{cases} 0, & k = 0; \\ \varepsilon_T \sum\limits_{i=0}^{k-1} e_D^i, & k > 0, \end{cases} \tag{9}$$

где $\varepsilon_T = \varepsilon(T) \approx \dfrac{\langle\sigma\rangle}{G_2}\left(1 - \exp(-\tau_2 T)\right)$; $e_D = \exp(-\tau_2 D)$.

На рис. 5 приведен полученный при численном решении уравнения (1) график осадки грунта при прохождении трех поездов по 60 вагонов с интервалом в 5 мин; время прохождения каждого поезда 2,9 мин. Функция нагрузки имеет вид, показанный на рис. 3. На рис. 5 также показано приближенное решение с использованием выражения (8), дающего максимумы функции деформации грунта.

Если пускать поезда друг за другом без перерыва, т. е. положить $D = T$, то график осадки грунта будет выглядеть, как на рис 6.

Из выражения (6) следует, что максимально возможная остаточная деформация грунта достижима при $t \to \infty$ (т. е. при прохождении подряд без перерыва бесконечного числа поездов или одного бесконечного поезда) и с учетом (9) равна

$$S_{\max\, ost} = \frac{\langle\sigma\rangle}{G_2}.$$

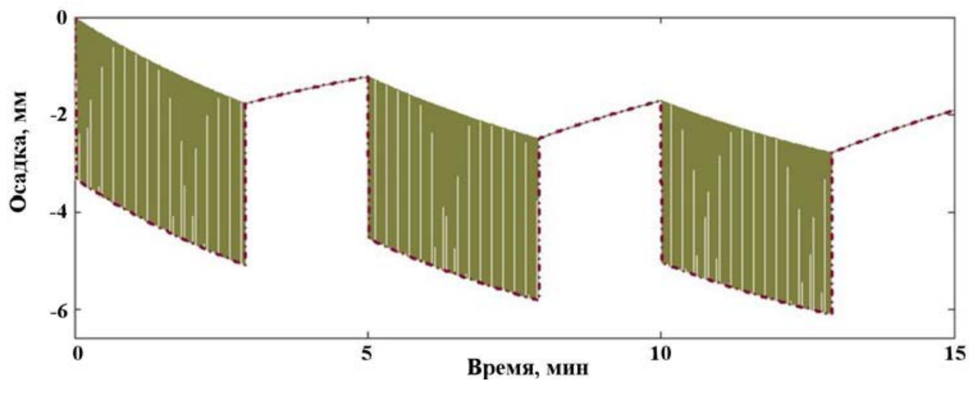

Рис. 5. Осадка грунта при прохождении трех поездов по 60 вагонов, интервал между поездами 5 мин, время прохождения одного поезда 2,9 мин: —— — численное решение; - · - — максимальная просадка

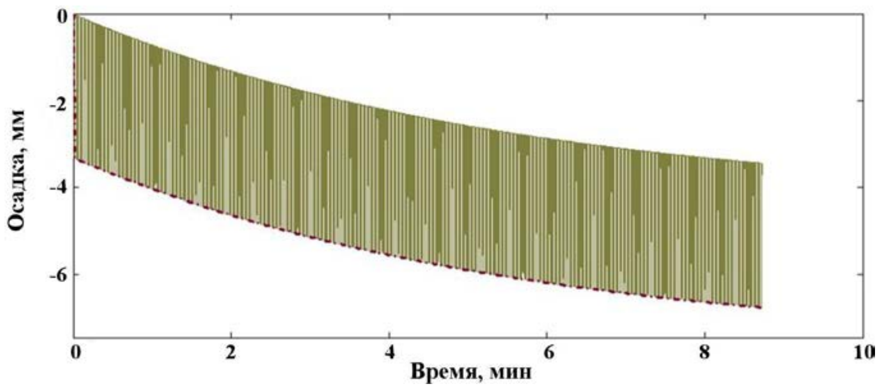

Рис. 6. Осадка грунта при $D = T = 2{,}9$ мин при прохождении трех поездов подряд: — численное решение; - · - — максимальная осадка

Из выражения (7) следует, что максимальная осадка грунта под поездом равна (с учетом упругой осадки)

$$S_{\max} = \frac{\langle\sigma\rangle}{G_2} + \frac{\sigma_0}{G_1}.$$

Из (8) следует, что остаточная деформация при прохождении k-го поезда равна

$$s_{ost} = S_k = \frac{\langle\sigma\rangle}{G_2}\left(1 - \exp\left(-\tau_2 T\right)\right)\sum_{i=0}^{k} e_D^i. \tag{10}$$

Сумма в выражении (10) представляет собой геометрическую прогрессию. При бесконечном числе поездов, проходящих с временным интервалом D, выражение (10) будет стремиться к

$$s_{ost} = \frac{\langle\sigma\rangle}{G_2}\frac{1 - \exp\left(-\tau_2 T\right)}{1 - \exp\left(-\tau_2 D\right)}.$$

Соответственно максимальная осадка грунта (с учетом упругой осадки) под поездами, проходящими с интервалом D, равна

$$s_{max} = \frac{\langle\sigma\rangle}{G_2}\frac{1 - \exp\left(-\tau_2 T\right)}{1 - \exp\left(-\tau_2 D\right)} + \frac{\sigma_0}{G_1}.$$

Неоднородная по глубине нагрузка

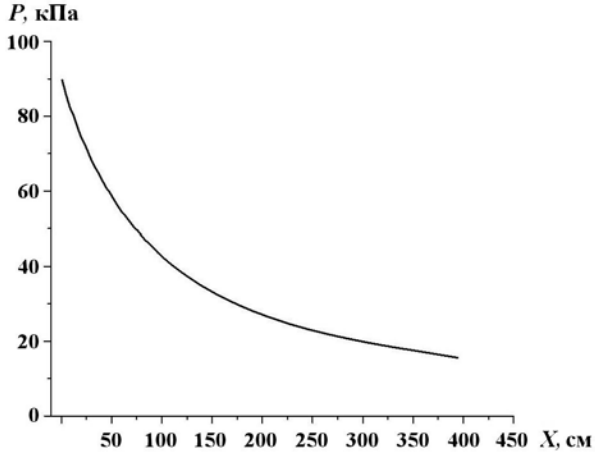

Рис. 7. Пример распределения нагрузки по глубине

На практике напряжение σ в уравнении (1) зависит не только от времени, но и от глубины слоя грунта, поскольку нагрузка распределяется вглубь неравномерно (рис. 7).

В работе [1] было показано, что при синусоидальной форме функции нагрузки ее зависимость от глубины слоя грунта можно учесть, проинтегрировав функцию нагрузки по глубине. Обобщим этот результат на любой вид функции нагрузки от времени.

Рассмотрим толстый массив однородного грунта, в котором не меняются по глубине параметры упругости и вязкости, но меняется нагрузка. Можно мысленно разделить массив грунта на слои, нагрузку на каждый из которых по глубине можно считать постоянной. Полная осадка такого массива под нагрузкой равна

$$r\left(t\right)=\sum_{k}\varepsilon_{k}\left(t\right)dz_{k},$$

где ε_k — деформация k-го слоя; dz_k — толщина k-го слоя.

При бесконечном количестве слоев

$$r\left(t\right)=\int\limits_{0}^{H}\varepsilon\left(z,t\right)dz,$$

где H — толщина всего слоя грунта. Подставив выражения (2) и (3), получим

$$r\left(t\right)=\exp\left(-\tau_{2}t\right)\int\limits_{0}^{t}\int\limits_{0}^{H}\left(\frac{G_{1}+G_{2}}{G_{1}\eta_{2}}\sigma+\frac{1}{G_{1}}\frac{d\sigma}{dt}\right)dz\exp\left(\tau_{2}t'\right)dt'=$$

$$=\exp\left(-\tau_{2}t\right)\int\limits_{0}^{t}\left(\frac{G_{1}+G_{2}}{G_{1}\eta_{2}}\int\limits_{0}^{H}\sigma\left(z,t\right)dz+\frac{1}{G_{1}}\frac{d}{dt}\int\limits_{0}^{H}\sigma\left(z,t\right)dz\right)\exp\left(\tau_{2}t'\right)dt';$$

$$\varepsilon\left(t\right)=\exp\left(-\tau_{2}t\right)\int\limits_{0}^{t}\widehat{F}\left(t'\right)\exp\left(\tau_{2}t'\right)dt',$$

где $\widehat{F}\left(t\right)=\begin{cases}\dfrac{G_{1}+G_{2}}{G_{1}\eta_{2}}\left\langle\sigma\right\rangle_{z}+\dfrac{1}{G_{1}}\dfrac{d}{dt}\left\langle\sigma\right\rangle_{z} & \text{при}\quad t\le T;\\ 0 & \text{при}\quad t>T;\end{cases}$

$\left\langle\sigma\right\rangle_{z}\left(t\right)=\dfrac{1}{H}\int\limits_{0}^{H}\sigma\left(z,t\right)dz$ — интегральное среднее функции нагрузки по толщине грунта, которое зависит только от t.

Таким образом, чтобы вычислить полную осадку грунта при однородных параметрах упругости и вязкости, но при неоднородной по глубине нагрузке, достаточно вместо функции $\sigma\left(z,t\right)$ брать $\left\langle\sigma\right\rangle_{z}\left(t\right)$.

Если имеется несколько слоев с различными параметрами упругости и вязкости, то суммарная деформация всего массива грунта будет равна

$$\varepsilon\left(t\right)=\sum_{k}\exp\left(-\tau_{2_k}t\right)\int\limits_{0}^{t}F_{k}\left(t'\right)\exp\left(\tau_{2_k}t'\right)dt',$$

$$F_{k}\left(t\right)=\frac{G_{1_k}+G_{2_k}}{G_{1_k}\eta_{2_k}}\left\langle\sigma\right\rangle_{z_k}\left(t\right)+\frac{1}{G_{1_k}}\frac{d}{dt}\left\langle\sigma\right\rangle_{z_k}\left(t\right),$$

где k — номер слоя; G_{1_k}, G_{2_k}, η_{2_k} — параметры упругости и вязкости k-го слоя; $\tau_{2_k}=G_{2_k}/\eta_{2_k}$; $\left\langle\sigma\right\rangle_{z_k}\left(t\right)$ — интегральное среднее функции $\sigma\left(z,t\right)$ по глубине для k-го слоя.

Выражение для максимальной деформации массива грунта:

$$\varepsilon_{\max}\left(t\right)=\sum_{k}\varepsilon_{k\max}\left(t\right).$$

Здесь $\varepsilon_{k\max}\left(t\right)$ — максимальная деформация k-го слоя грунта:

$$\varepsilon_{k\max}\left(t\right)=\begin{cases}\dfrac{1}{G_{2_k}}\Big(1-\exp\left(-\tau_{2_k}t\right)\Big)\Big\langle\left\langle\sigma\right\rangle_{z_k}\Big\rangle_{t}+\dfrac{\sigma_{0_k}}{G_{1_k}} & \text{при}\quad t\le T;\\ \varepsilon_{T_k}^{0}\exp\Big(-\tau_{2_k}\left(t-T\right)\Big) & \text{при}\quad t>T;\end{cases}\qquad(11)$$

$\left\langle \langle\sigma\rangle_{z_k} \right\rangle_t = \dfrac{1}{T_1}\int\limits_0^{T_1} \langle\sigma\rangle_{z_k}(t')\,dt'$ — интегральное среднее от $\langle\sigma\rangle_{z_k}(t)$ по времени прохождения одного вагона; σ_{0_k} — максимальное значение $\langle\sigma\rangle_{z_k}(t)$ за время прохождения одного вагона.

Для примера рассмотрим задачу о прохождении поезда в 60 вагонов за время 2,9 мин. Для профиля давления в подбалластном слое от поездной нагрузки, показанного на рис. 7, интегральное среднее функции нагрузки по глубине $\langle\sigma\rangle_z(t) = 33{,}5\,\text{кПа}$. Тогда для вагона с четырьмя осями функция нагрузки от времени будет выглядеть, как на рис. 3. Интегральное среднее функции $\sigma(z,t)$ по глубине и времени прохождения поезда T равно $\left\langle \langle\sigma\rangle_{z_k} \right\rangle_t = 6\,740\,\text{Па}$. Подставив это значение в выражение (11), получим зависимость осадки грунта под поездом в данной точке от времени (рис. 8).

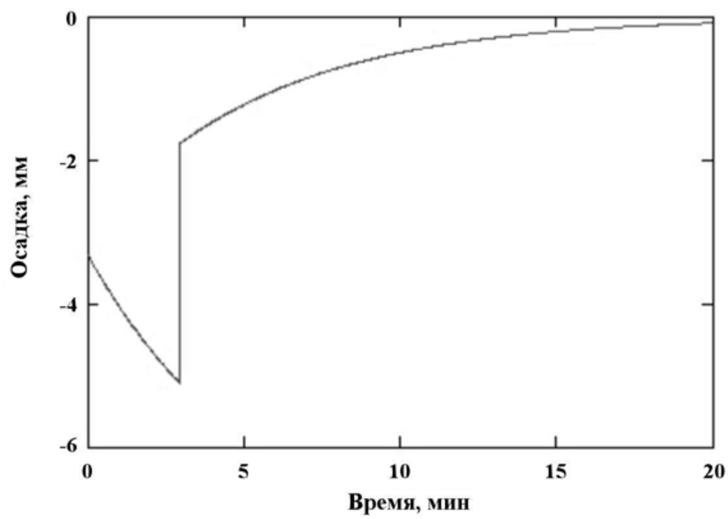

Рис. 8. Осадка грунта при прохождении поезда в 60 вагонов за 2,9 мин, полученная с помощью выражения (11)

Заключение

В работе рассмотрено обобщение модели стандартного линейного твердого тела для расчета деформации земляного полотна в случае произвольного вида функции поездной нагрузки. Доказана применимость этой модели при неоднородной по глубине нагрузке. Предложены простые оценочные формулы для деформации грунта при прохождении одного или нескольких поездов, а также релаксации пути после прохождения поезда. Полученная методика позволяет прогнозировать рост динамических отступлений в вертикальной плоскости при прохождении длинносоставных поездов. Для вязкоупругих грунтов возможна ситуация, когда динамические отступления превышают нормативные значения.

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

Список литературы

1. *Соловьёв В. П., Анисин А. В., Анисина И. М., Надёжин С. С., Железнов М. М., Певзнер В. О., Третьяков И. В.* Модель деформируемости грунтового основания железнодорожного пути при

пропуске длинносоставных поездов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2019. Вып. 3. С. 84—89.
Solovev V. P., Anisin A. V., Anisina I. M., Nadezhin S. S., Zheleznov M. M., Pevzner V. O., Tretyakov I. V. Model deformiruemosti gruntovogo osnovaniya zheleznodorozhnogo puti pri propuske dlinnosostavnykh poezdov // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2019. Vyp. 3. S. 84—89.

2. *Железнов М. М., Певзнер В. О., Соловьёв В. П., Анисин А. В., Анисина И. М., Надежин С. С., Третьяков И. В.* Влияние длительности и частоты приложения нагрузки на напряженно-деформированное состояние пути // Вестник НИИЖТ. 2018. Т. 77, № 6. С. 364—367.
Zheleznov M. M., Pevzner V. O., Solovev V. P., Anisin A. V., Anisina I. M., Nadezhin S. S., Tretyakov I. V. Vliyanie dlitelnosti i chastoty prilozheniya nagruzki na napryazhenno-deformirovannoe sostoyanie puti // Vestnik VNIIZhT. 2018. T. 77, № 6. S. 364—367.

3. *Мейз Дж.* Теория и задачи механики сплошных сред. М.: Мир, 1974.
Meiz Dzh. Teoriya i zadachi mekhaniki sploshnykh sred. M.: Mir, 1974.

Статья поступила в редакцию 24.02.21.

УДК 519.6

ВЕКТОРНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ "ЛОГОС-АЭРОГИДРО" СРЕДСТВАМИ БИБЛИОТЕК IAL

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

В рамках программного модуля "Логос-АэроГидро" пакета программ "Логос" для дискретизации уравнения Навье—Стокса без расщепления используется метод конечных объемов на неструктурированных сетках, приводящий к решению СЛАУ с мелкоблочной матрицей для нахождения нескольких взаимозависимых неизвестных в каждой ячейке сетки. При распараллеливании вычислительных алгоритмов решения СЛАУ используются технологии SSE2-SSE4.2 (Intel®LegacySSE), Intel®AVX, Intel®AVX512. Описываются разработанные в РФЯЦ-ВНИИЭФ библиотеки IAL, обсуждаются проблемы, связанные с созданием оптимизированных библиотек. Приводятся результаты применения библиотек IAL для векторной оптимизации программного модуля "Логос-АэроГидро".

Ключевые слова: векторная оптимизация, SSE, AVX, пакет программ "Логос".

Введение

CAE (Computed-aided engineering) приложения в вычислительном плане являются одними из самых ресурсоемких. Все возрастающие возможности вычислительных систем не обеспечивают нужной динамики увеличения мощности, связанной как с постоянным усложнением алгоритмов, так и с необходимостью увеличения размерности расчетных сеток при моделировании сложных инженерных изделий.

CAE-приложения работают с большими массивами однотипных данных, что, с одной стороны, как нельзя лучше укладывается в парадигму векторных или SIMD (одна инструкция — много данных) вычислений, а с другой стороны, приводит к относительно невысокой плотности арифметических операций на единицу данных.

Последнее обстоятельство обосновывало определенный скептицизм относительно перспектив векторной оптимизации CAE-приложений, но появившиеся в последнее время публикации на эту тему [1] и собственный опыт автора убеждают в обратном.

Поскольку оптимизация на уровне классических C/C++, а также распараллеливание методом деления на потоки и MPI-процессы ограничены числом процессоров и ядер ЭВМ, векторные расширения архитектуры x86-64 открывают новые возможности ускорения CAE-приложений.

Вместе с тем оптимизация с использованием векторных расширений SSE—AVX существенно сложнее методов оптимизации, применяемых в случае скалярных архитектур, и требует разработки новых низкоуровневых вычислительных алгоритмов, позволяющих учесть латентность используемых векторных операций и максимально загрузить векторные типы данных.

К настоящему времени имеется уже достаточно большое количество векторных архитектур, таких как, например, SSE2, ..., SSE4.2, AVX, AVX2, AVX512, KNC, KNL. В составе одной суперкомпьютерной системы можно наблюдать если не все, то достаточно большое их разнообразие. Наличие большого числа векторных расширений ставит задачу разработки технологий, позволяющих приложению динамически настраиваться на тип задействованного процессора и использовать наиболее эффективные для данной архитектуры варианты кода.

Матрично-векторные операции в программном модуле "Логос-АэроГидро"

Матрично-векторные операции являются одними из самых ресурсоемких во множестве современных приложений, включая нейронные сети, используемые в системах искусственного интеллекта.

Исключением не являются и CAE-системы. Моделирование течений вязкого сжимаемого газа в программном модуле "Логос-АэроГидро" производится при помощи методик, которые основываются на решении полной системы уравнений Навье—Стокса [2] посредством алгебраического многосеточного решателя систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), — его описание для решения СЛАУ с одним неизвестным в каждой ячейке сетки для методики "Логос Simple" приводится в статье [3]. Решение уравнений Навье—Стокса порождает СЛАУ с блочной матрицей, элементами которой являются матрицы небольших размеров — от 3×3 до 16×16. Это обуславливает интенсивное использование матричных, матрично-матричных, матрично-векторных и векторно-векторных операций.

Проблемы повышения качества программных комплексов

Векторная оптимизация больших программных комплексов подразумевает использование как возможностей компилятора путем задания опций и соответствующего перестроения алгоритмов и структур данных, так и оптимизированных библиотек, таких как Intel®IPP и MKL.

Специфика алгоритмов пакета программ "Логос" предполагает работу с массивами векторов и плотных матриц небольших размеров — от 3×3 до 16×16. Адресация данных массивов производится в основном при помощи относительных адресов — индексов, сохраняемых во внешней памяти. Адаптация интерфейсов пакета программ "Логос" к интерфейсам стандартных библиотек методом конвертации структур данных во время выполнения приводит к недопустимо высоким издержкам по памяти и времени.

Функциональность указанных библиотек ограничена относительно простыми операциями. В то же время высокую эффективность показывает совмещение нескольких простых операций в одном цикле за счет экономии на обменах *регистр—память* (registry spill).

Комплекс указанных причин в совокупности стимулирует разработку собственных оптимизированных библиотек и всего сопутствующего технологического обеспечения.

Градация пакетов программ на свободные, коммерческие и промышленные в основном определяется статистикой по количеству обнаруженных в них ошибок. Для минимизации количества ошибок необходима разработка специализированных технологий, ориентированных на всестороннюю оценку качества полученного объектного кода.

Технология оптимизации пакета программ подразумевает его деление на относительно небольшие фрагменты по функциональному признаку (функции) с последующим написанием всесторонних тестов для каждого фрагмента. Поскольку каждая функция имеет относительно небольшие размеры, то поиск и исправление ошибок в ней занимают незначительное время.

Технология создания оптимизированных библиотек IAL

Структурно технология создания оптимизированных библиотек IAL может быть представлена в виде совокупности систем, реализованных различными языковыми средствами, куда входят сами библиотеки, написанные с использованием векторного расширения языка C, тесты и тестовые системы, написанные на C++ и ассемблере, а также система построения библиотек, тестов и тестовых систем, написанная на языках make, Perl, bash, PhP (рис. 1).

В рамках разработанной технологии IAL осуществляется построение статических, динамических и диспетчируемых версий библиотек. Диспетчеризация позволяет переключаться на оптимизированные для конкретной архитектуры ветки кода библиотек. При этом основной код приложения является неизменным, что делает воз-

Рис. 1. Компоненты технологии создания оптимизированных библиотек

можным максимально эффективное использование одного исполняемого модуля на любых архитектурах x86-64.

Разработку кода оптимизированной библиотеки можно представить в виде циклического процесса, изображенного на рис. 2.

Процесс состоит из следующих этапов:

1) создание первоначального С-кода функции;
2) создание и модификация тестов функции средствами тестовых систем;
3) скалярная и векторная оптимизация функции;
4) построение библиотеки функции, ее тестирование и переход по необходимости к этапу 2 или 3;
5) построение диспетчируемой версии библиотеки функции для ОС Windows и Linux;
6) тестирование на целевых архитектурах и переход по необходимости к этапу 2.

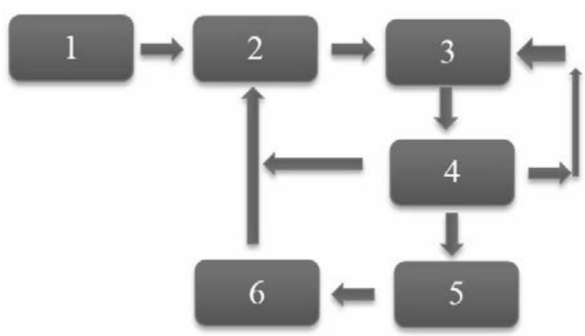

Рис. 2. Этапы создания оптимизированной библиотеки

Векторная оптимизация программного модуля "Логос-АэроГидро"

Рассмотрим оптимизацию "Логос-АэроГидро" в части расчета аэродинамических характеристик сложных конструкций. Характерной особенностью функционирования программных модулей подобного типа является относительно большой объем входных данных в виде сеток, моделей и большой размер множества внутренних переменных, что обуславливает активный обмен данных типа *регистр—память*, а также относительно большое отношение числа таких обменов к числу арифметических операций.

Векторизованная версия программного модуля "Логос-АэроГидро" базируется на оптимизированных библиотеках IAL.

Функции библиотек оптимизированы для архитектур SSE2-SSE4.2, AVX, AVX512.

В состав библиотек IAL входят:

1) IALM — матричные и матрично-векторные операции;
2) IALS — операции с векторами;
3) IALL — аэродинамические (гидродинамических) алгоритмы;
4) IALKERNEL — основные операции, такие как определение типа процессора и настройка диспетчера кода, операции с памятью, управление использованием OMP-потоков функциями IAL-библиотек.

Библиотеки IAL дополнительно включают тесты функций и тестовые системы. Система построения служит для построения тестов, тестовых систем и библиотек.

При векторной оптимизации библиотек IAL использовалось векторное расширение языка C [4] для инструкций SSE2-SSE4.2, AVX, AVX512 [5], что существенно ускорило матрично-векторные операции по сравнению с оптимизированным С-кодом. Основным приемом оптимизации является разработка для каждого размера матрицы (в основном от 3×3 до 16×16), входящей в блочно-разреженную матрицу СЛАУ, своего векторного вычислительного алгоритма, учитывающего выровненность данных, а также количество и латентность используемых векторных операций.

На рис. 3 приведен пример С-кода функции умножения матрицы на матрицу с размерами 4×4, оптимизированного методом *раскрутки цикла.* Данный код выгодно отличается от функции общего вида отсутствием цикла и соответственно затрат на управление циклом. Наличие большого числа арифметических операций позволяет компилятору составить код с минимальным количеством простоев конвейера (pipe stalls) по причине зависимости по данным.

На рис. 4 показано, как та же задача решена с использованием векторного расширения SSE.

На рис. 5 показано решение той же задачи с использованием векторного расширения AVX. В реализации с использованием этого векторного расширения задача раскрутки цикла по строкам матрицы, как правило, достаточно успешно решается компилятором.

На рис. 6 приводятся некоторые данные по производительности вышеописанных вариантов реализации умножения матриц. Используются следующие обозначения: *mul_mms* — ал-

```
void MatMat_4 (const float * __restrict matrix1, const float * __restrict matrix2, float * __restrict
result){MEM_ZERO_32( result, 16 );
        result[ 0 ] += matrix1[ 0 ] * matrix2[ 0 ];
        result[ 0 ] += matrix1[ 1 ] * matrix2[ 4 ];
        result[ 0 ] += matrix1[ 2 ] * matrix2[ 8 ];
        result[ 0 ] += matrix1[ 3 ] * matrix2[ 12 ];
        result[ 1 ] += matrix1[ 0 ] * matrix2[ 1 ];
        result[ 1 ] += matrix1[ 1 ] * matrix2[ 5 ];
        result[ 1 ] += matrix1[ 2 ] * matrix2[ 9 ];
        result[ 1 ] += matrix1[ 3 ] * matrix2[ 13 ];
        ..........................
        result[ 15 ] += matrix1[ 12 ] * matrix2[ 3 ];
        result[ 15 ] += matrix1[ 13 ] * matrix2[ 7 ];
        result[ 15 ] += matrix1[ 14 ] * matrix2[ 11 ];
        result[ 15 ] += matrix1[ 15 ] * matrix2[ 15 ];
        return;
}
```

Рис. 3. Оптимизация умножения матрицы на матрицу с размерами 4×4 методом раскрутки цикла

```
void MatMat_4_SSE( const float* p_Orig1, int src1Stride_step1, int src1Width, int src1Height, const float*
p_Orig2, int src2Stride_step1, int src2Width, int src2Height, float* p_Dest, int jDstStride_step1 )
{
    __m128   b0, b1, b2, b3;
    __m128  row, rslt, tmprVal, dst;
    /* Загрузка матрицы B. */
    b0      = _mm_loadu_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig2))[0]));
    b1      = _mm_loadu_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig2 + src2Stride_step1))[0]));
    b2      = _mm_loadu_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig2 + 2*src2Stride_step1))[0]));
    b3      = _mm_loadu_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig2 + 3*src2Stride_step1))[0]));
    /* Вычисляем первый ряд результирующей матрицы */
    row     = _mm_load1_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig1))[0]));
    rslt    = _mm_mul_ps(row, b0);
    row     = _mm_load1_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig1))[1]));
    rslt    = _mm_add_ps(rslt, _mm_mul_ps(row, b1));
    row     = _mm_load1_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig1))[2]));
    rslt    = _mm_add_ps(rslt, _mm_mul_ps(row, b2));
    row     = _mm_load1_ps(&(((float*)((Ial8u*)p_Orig1))[3]));
    rslt    = _mm_add_ps(rslt, _mm_mul_ps(row, b3));
    _mm_storel_pi((__m64*)&(((float*)((Ial8u*)p_Dest))[0]), rslt);
    _mm_storeh_pi((__m64*)&(((float*)((Ial8u*)p_Dest))[2]), rslt);
    /* Вычисляем второй ряд результирующей матрицы */
.........................
    /* Вычисляем третий ряд результирующей матрицы */
 .........................
   /* Вычисляем четвёртый ряд результирующей матрицы */
.........................
    return ;
}
```

Рис. 4. Реализация операции умножения квадратных матриц 4×4 при помощи векторного расширения SSE, оптимизированная методом раскрутки цикла (суффикс step1 означает длину буфера строки в байтах; step2 — длину буфера числа в байтах)

горитм умножения матриц общего вида на C; *mul_mmo* — алгоритм умножения матриц общего вида на C, оптимизированный методом фиксации числа циклов, что подразумевает создание отдельного кода для каждого размера матриц; *mul_mmi* — векторизованный алгоритм умножения матриц общего вида, оптимизированный при помощи векторного расширения C.

Результаты приведены в тактах процессора и рассчитывались по формуле

$$N = \frac{o}{(2n-1)\,n^2},$$

где o — число тактов процессора, потраченных на вычисление алгоритма nul_mm^*; n — размер матрицы; N — число тактов процессора, потраченных на одну арифметическую операцию.

Для наиболее часто используемых размеров матриц 5×5 скорость векторизованного кода в 1,5 раза выше скалярного оптимизированного

```
void MatMat_4_AVX( const float* p_Orig1, int src1Stride_step1, int src1Width, int src1Height, const float*
p_Orig2, int src2Stride_step1, int src2Width, int src2Height, float* p_Dest, int jDstStride_step1 )
{
        __m256i mask0;
        __m256          row0, row1, row2, row3 ;
        __m256          r0, r1, r2, r3 ;
        __m256          d0; int *p = (int*)&mask0;
        int             i;
        p[0] = p[1] = p[2] = p[3] = -1;
        p[4] = 0 p[5] = p[6] = p[7] = 0;
        row0 = _mm256_maskload_ps((float*)((char*)p_Orig2), mask0);
        row1 = _mm256_maskload_ps((float*)((char*)p_Orig2 +   src2Stride_step1), mask0);
        row2 = _mm256_maskload_ps((float*)((char*)p_Orig2 + 2*src2Stride_step1), mask0);
        row3 = _mm256_maskload_ps((float*)((char*)p_Orig2 + 3*src2Stride_step1), mask0);
       for( i=0; i<4; i++) {
           r0  = _mm256_broadcast_ss((float*)((char*) p_Orig1    + i*src1Stride_step1));
           r1  = _mm256_broadcast_ss((float*)((char*)(p_Orig1+1) + i*src1Stride_step1));
           r2  = _mm256_broadcast_ss((float*)((char*)(p_Orig1+2) + i*src1Stride_step1));
           r3  = _mm256_broadcast_ss((float*)((char*)(p_Orig1+3) + i*src1Stride_step1));
           d0  = _mm256_mul_ps(row0, r0);
           d0  = _mm256_add_ps(d0, _mm256_mul_ps(row1, r1));
           d0  = _mm256_add_ps(d0, _mm256_mul_ps(row2, r2));
           d0  = _mm256_add_ps(d0, _mm256_mul_ps(row3, r3));
           _mm256_maskstore_ps((float*)((char*)p_Dest + i*jDstStride_step1), mask0, d0);
       }
        _mm256_zeroupper();
        return 0;
}
```

Рис. 5. Реализация операции умножения квадратных матриц 4×4 при помощи векторного расширения AVX

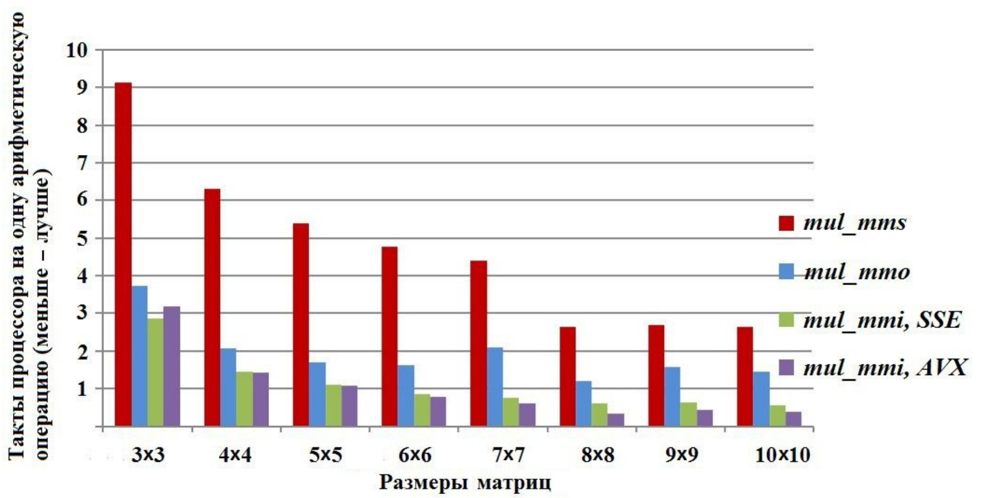

Рис. 6. Производительность алгоритмов *mul_mm** на серверной архитектуре Intel®Sandy Bridge

(*mul_mmo*) и в 5,5 раз выше С-кода общего вида (*mul_mms*).

Начиная с размеров матриц 8×8, скорость векторизованного кода в 4 раза (SSE) и 8 раз (AVX) выше С-кода общего вида (*mul_mms*) и соответственно в 2 и 4,5 раза выше скалярного оптимизированного кода (*mul_mmo*).

Эффективность векторных операций SSE—AVX растет вплоть до размеров матриц 8×8, что связано как с наполняемостью векторных регистров, так и с уменьшением удельных затрат на управление циклом.

Эффективность скалярного кода (*mul_mmo*) растет вплоть до размеров 8×8, что связано с уменьшением удельных затрат на управление циклом.

AVX-код начинает опережать SSE, начиная с размеров матриц 5×5, что связано с размерами регистров (32 и 16 байт соответственно).

Результаты применения библиотек IAL

Далее приведены результаты сравнения базового варианта программного модуля "Логос-АэроГидро" без оптимизации при помощи библиотек IAL и с применением библиотек IAL.

На рис. 7 показан профиль матрично-векторных операций "Логос-АэроГидро" на задаче сверхзвукового обтекания крыла самолета, полученный при помощи профилировщика Intel VTune Amplifier XE 2013. Было выполнено 5 000 итераций, начиная с итерации с номером 5 000. Профилирование производилось в один поток на ЭВМ Intel(R)Core(TM)i5-2310CPU@2,90 GHz.

Функции умножения матрицы на вектор с последующим вычитанием (или прибавлением) результата (`MatVecSub (Add)`), умножения матрицы на матрицу (`Mul`), умножения матрицы на вектор (`MatVec`), инверсии матриц (`MatInv`) занимают около 32 % от общего времени счета задачи.

На рис. 7 слева приведены данные по вкладу функций, оптимизированных методом раскрутки цикла (см. рис. 3). Справа — данные по вкладу функций, оптимизированных при помощи векторных расширений SSE—AVX. В обозначениях функций 32f соответствует одинарной точности, 64f — двойной. Из рисунка видно, что суммарные затраты процессорного времени перечисленных функций снизились в 2,1 раза.

На рис. 8 представлено распределение процессорного времени "Логос-АэроГидро" до и после оптимизации SSE—AVX при размерах матриц 14×14, где ускорение счета задачи достигло 18 %.

Заключение

Векторная оптимизация матрично-векторных операций программного модуля "Логос-АэроГидро" пакета программ "Логос" при помощи библиотек IAL сокращает время расчета, обеспечивает архитектурную универсальность и существенно облегчает процесс построения и использования приложения, обеспечивая таким образом его необходимые рыночные качества.

Относительно невысокая средняя плотность арифметических операций на единицу данных

MatVecSub_5	2511.710s	MulSub_maviv_5x5_32f	1082.334s
MatVecAdd_5	484.516s	MulAdd_mavivi_5x5_32f	421.748s
MATRIX_N::Mul	464.569s	Multiply_mm_64f	189.003s
MatVec_5	318.399s	Multiply_mv_32f	146.215s
realLevel::MatInv	281.762s	Reverse_m_64f_5x5_W7	70.119s

Рис. 7. Профилирование матрично-векторных и матричных операций "Логос-АэроГидро" при помощи Intel VTune Amplifier XE 2013 на задаче сверхзвукового обтекания крыла самолета

Рис. 8. Распределение процессорного времени "Логос-АэроГидро" до (*а*) и после (*б*) IAL-оптимизации: ■ — матрично-векторные операции; ■ — прочие операции

CAE-приложений не снижает эффективности векторной оптимизации матрично-векторных операций, в том числе за счет сопутствующего уменьшения числа обменов *регистр—память*. В результате векторной оптимизации матрично-векторных операций программного модуля "Логос-АэроГидро" при помощи библиотек IAL, оптимизированных для векторных расширений SSE—AVX, суммарные затраты процессорного времени на выполнение данных операций снизились более чем в 2 раза, а всего расчета — от 9 до 18 % на кластерной машине.

Разработанная технология создания библиотек IAL обеспечивает высокий уровень качества оптимизированных библиотек за счет развитой системы тестирования и построения кода. Указанная технология обеспечивает создание библиотек, способных динамически настраиваться на тип задействованного процессора и использовать наиболее эффективные для данной архитектуры варианты кода.

Список литературы

1. *Getmanskiy V., Andreev A. E., Alekseev S., Gorobtsov A. S., Egunov V., Kharkov E.* Optimization and parallelization of CAE software stress-strain solver for heterogeneous computing hardware // Conf. on Creativity in Intelligent Technologies and Data Science CIT&DS 2017. https://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-319-65551-2_41.

2. *Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Зеленский Д. К.* Многофункциональный пакет программ "Логос Аэро-Гидро" для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на суперЭВМ. Базовые технологии и алгоритмы // Труды XII Межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 11—15 октября, 2010. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. С. 215—230.

   Kozelkov A. S., Deryugin Yu. N., Zelenskiy D. K. Mnogofunktsionalny paket programm "Logos Aero-Gidro" dlya rascheta zadach gidrodinamiki i teplomassoperenosa na superEVM. Bazovye tekhnologii i algoritmy // Trudy XII Mezhd. seminara "Supervychysleniya i matematicheskoe modelirovanie". Sarov, 11—15 oktyabrya, 2010. Sarov: RFYaTs-VNIIEF. S. 215—230.

3. *Козелков А. С., Дерюгин Ю. Н., Лашкин С. В., Силаев Д. П., Симонов П. Г., Тятюшкина Е. С.* Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 4. С. 44—56.

   Kozelkov A. S., Deryugin Yu. N., Lashkin S. V., Silaev D. P., Simonov P. G., Tyatyushkina E. S. Realizatsiya metoda rascheta vyazkoy neszhimaemoy zhidkosti s ispolzovaniem mnogosetochnogo metoda na osnove algoritma SIMPLE v pakete programm LOGOS // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2013. Vyp. 4. S. 44—56.

4. Intrinsics, USA, 2016. https://software.intel.com.

5. Intel®64 and IA-32 Architectures Optimiztion Reference Manual. Order Number 248966-026, April 2012. https://software.intel.com.

Статья поступила в редакцию 25.03.20.

УДК 629.124.791

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДАННЫХ НАТУРНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ ЛЕДОКОЛА НАБЕГАМИ

Е. М. Грамузов, В. А. Зуев, Н. В. Калинина, А. А. Куркин
(НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород)

Внимание к арктическому судоходству постоянно растет. Наиболее универсальным средством борьбы с ледовыми затруднениями является ледокольный флот. При эксплуатации ледоколов часто встречаются тяжелые ледовые условия, в которых невозможно двигаться непрерывным ходом, и ледоколы вынуждены прибегать к работе *набегами*. Этот способ движения в настоящее время наименее изучен. В его развитии важную роль играют теоретические и экспериментальные исследования, обобщение опыта эксплуатации ледоколов. Работа ледокола набегами представляет собой циклическое движение, каждый цикл которого складывается из этапов. Приведены нелинейные дифференциальные уравнения второго порядка, описывающие все этапы движения ледокола набегами, и их аналитические решения, полученные авторами ранее. Предложены методы использования данных, полученных в результате проведенных натурных экспериментов и накопленных ранее, для получения коэффициентов полуэмпирических моделей циклического движения набегами. Показана эффективность применения предложенных методов.

Ключевые слова: лед, движение ледокола набегами, математическое моделирование, полуэмпирическая модель, данные натурных экспериментов.

Введение

При эксплуатации ледоколов часто встречаются тяжелые ледовые условия, в которых невозможно двигаться непрерывным ходом. Поэтому ледоколы вынуждены прибегать к работе *набегами*. Работа набегами представляет собой циклическое движение, каждый цикл которого складывается из следующих этапов:

1) реверс пропульсивной установки ледокола с переднего хода на задний после остановки в сплошном льду;
2) ускоренный и замедленный отход в собственном канале битого льда от ненарушенного ледяного покрова;
3) реверс пропульсивной установки ледокола с заднего хода на передний;
4) ускоренное движение (разбег) ледокола в собственном канале битого льда для набора кинетической энергии при вхождении в ненарушенный ледяной покров;
5) замедленное продвижение (естественное торможение) в сплошном льду, которое продолжается до полной остановки.

Для дальнейшего продвижения необходимо осуществить реверс энергетической установки с переднего хода на задний, и циклический процесс повторяется.

Прежде были предприняты попытки изучения вопросов, связанных с движением ледоколов набегами [1—5], и настоящая работа является продолжением и развитием ранее проведенных исследований.

Ускоренное движение ледокола

Уравнение ускоренного движения задним или передним ходом имеет соответственно вид [5]

$$\ddot{x} + A_1\dot{x}^2 = B_1 \quad \text{или} \quad \ddot{x} + A_3\dot{x}^2 = B_3. \tag{1}$$

Здесь $A_1 = \dfrac{1{,}4P_{\text{шзх}} + k_{1\text{зх}}v_0^2}{\left(1 + k'_{11}\right)Dv_0^2}$; $B_1 = \dfrac{P_{\text{шзх}} - k_{2\text{зх}}}{\left(1 + k'_{11}\right)D}$; $A_3 = \dfrac{1{,}4P_{\text{шпх}} + k_{1\text{пх}}v_0^{2\,\prime}}{\left(1 + k'_{11}\right)Dv_0^2}$; $B_3 = \dfrac{P_{\text{шпх}} - k_{2\text{пх}}}{\left(1 + k'_{11}\right)D}$;

$$k_1 = k_{\text{ид}}\left[c_{\text{и}}\rho_{\text{л}}h\frac{B}{2}\left(\Phi_{\text{и}} + f\Phi_{\text{ит}}\right) + c_{\text{г}}\rho h\frac{B}{2}\left({\Phi'}_{\text{г}} + f{\Phi'}_{\text{гт}}\right)\right]; \quad k_2 = k_{\text{п}}(\rho - \rho_{\text{л}})ghbB\left(\Phi'_{\text{п}} + f{\Phi'}_{\text{пт}}\right),$$

где $k_1 = k_{1\text{зх}}$ или $k_{1\text{пх}}$, $k_2 = k_{2\text{зх}}$ или $k_{2\text{пх}}$ в зависимости от направления движения (задний или передний ход); x, $\dot{x}$, $\ddot{x}$ — соответственно перемещение, скорость и ускорение судна; $P_{\text{шзх}}$, $P_{\text{шпх}}$ — тяга ледокола на швартовых на заднем и переднем ходу соответственно; v_0 — скорость движения на чистой воде при заданной мощности; k'_{11} — коэффициент присоединенных масс воды и льда; D — водоизмещение; $c_{\text{и}}$ — безразмерный коэффициент, учитывающий присоединенные массы воды в составе импульсного сопротивления льдин; $\rho_{\text{л}}$ — плотность льда; h — толщина льда; B — ширина ледокола; f — коэффициент трения льда об обшивку ледокола; $c_{\text{г}}$ — коэффициент гидродинамического сопротивления при раздвигании льдин; ρ — плотность воды; g — ускорение свободного падения. Средняя протяженность обломков льда b, зависящая от его толщины, как показывают наблюдения, определяется изгибом пластин на упругом основании и приближенно может быть получена из соотношения $b\alpha = 0{,}312$. Здесь $\alpha = \sqrt[4]{(\rho g)/d}$ — параметр изгиба пластины на упругом основании; $d = Eh^3\big/\left[12(1-\mu^2)\right]$ — цилиндрическая жесткость ледяной пластины; E, μ — модуль упругости и коэффициент Пуассона льда. Функции $\Phi_{\text{и}}$, $\Phi_{\text{ит}}$, $\Phi'_{\text{г}}$, $\Phi'_{\text{гт}}$, $\Phi'_{\text{п}}$, $\Phi'_{\text{пт}}$, характеризующие форму корпуса, различны для переднего и заднего хода [1]. Эмпирические коэффициенты $k_{\text{п}}$, $k_{\text{ид}}$ компенсируют неточности теоретической модели сопротивления битого льда, которые определяются с учетом данных натурных экспериментов по работе ледоколов набегами: $k_{\text{п}}$ компенсирует неточность определения составляющей сопротивления битого льда, вызванного притапливанием и поворачиваем льдин, а $k_{\text{ид}}$ — составляющих импульсного и диссипативного сопротивления битого льда.

Торможение ледокола в сплошном льду

В результате разбега ледокол приобретает некоторую скорость $v_{\text{р}}$, с которой он внедряется в сплошной лед, продвигаясь до полной остановки. На этом этапе уравнение поступательного движения имеет вид

$$\begin{gathered}
\ddot{x} + A_4\dot{x}^2 = -B_4, \qquad (2)\\
A_4 = \frac{1{,}4P_{\text{шпх}} + k_3v_0^2}{(1 + k'_{11})Dv_0^2}, \quad B_4 = -\frac{P_{\text{шпх}} - k_4}{(1 + k'_{11})D},\\
k_3 = k_{\text{оv}}\rho_{\text{л}}hB\left[c_{\text{и}}\left(\Phi_{\text{и}} + f\Phi_{\text{ит}}\right) + \frac{c_{\text{г}}\rho\Omega_{\text{л}}}{\rho_{\text{л}}Bh}\left(\Phi_{\text{г}} + f\Phi_{\text{гт}}\right)\right],\\
k_4 = k_{\text{р}}\frac{h^4}{d\alpha}\left[\left(1 + f\gamma_{\text{лтф}}\right) + k_{\text{сф}}\gamma_{\text{сф}}\frac{d\alpha^2}{h}\sqrt{\frac{\text{tg}\varphi_{2\text{ф}}}{1 + \text{tg}^2\varphi_{2\text{ф}}}} + 0{,}66\left(1 + f\Phi_{\text{лт}}\right)B\alpha + \frac{k_{\text{сб}}\Phi_{\text{с}}d\alpha^3B}{h}\right] +\\
+ k_{\text{ост}}\left(\rho - \rho_{\text{л}}\right)gh\Omega_{\text{л}}\left(\Phi_{\text{п}} + f\Phi_{\text{пт}}\right) + k_{\text{с}}gh_{\text{с}}\Omega_{\text{л}}\left(\Phi_{\text{п}} + f\Phi_{\text{пт}}\right),
\end{gathered}$$

где $\Omega_{\text{л}}$ — площадь подводной части корпуса, облегаемая льдом; $k_{\text{сф}} = 1{,}5\cdot10^{-3}$ кПа$^{-1}$; $k_{\text{сб}} = 0{,}5\times$ $\times\,10^{-3}$ кПа$^{-1}$; $k_{\text{с}} = 0{,}3$ т/м^3; $h_{\text{с}}$ — толщина снега; $\varphi_{2\text{ф}}$ — угол притыкания конструктивной ватерлинии к диаметральной плоскости на форштевне; $\gamma_{\text{лтф}}$, $\gamma_{\text{сф}}$, $\Phi_{\text{и}}$, $\Phi_{\text{ит}}$, $\Phi_{\text{г}}$, $\Phi_{\text{гт}}$, $\Phi_{\text{лт}}$, $\Phi_{\text{с}}$, $\Phi_{\text{п}}$, $\Phi_{\text{пт}}$ —

функции, характеризующие форму корпуса [1]. Эмпирические коэффициенты $k_{\text{р}}$, $k_{\text{ост}}$, $k_{\text{o}v}$ компенсируют неточности теоретической модели сопротивления сплошного льда, а именно составляющей сопротивления разрушению, а также статической и зависящей от скорости составляющих сопротивления обломков льда. Коэффициенты $k_{\text{р}}$, $k_{\text{ост}}$, $k_{\text{o}v}$ определяются с учетом данных натурных экспериментов по ледопроходимости речных ледоколов набегами.

В выражении (2) $P_{\text{шпх}} < k_4$ и B_4 принимают положительные значения. Это соответствует торможению ледокола вплоть до полной остановки во льду толщиной, больше предельной.

При работе набегами возможен случай, когда толщина льда окажется меньше предельной. В этом случае скорость ледокола уменьшается не до нуля, а до установившейся скорости в сплошном ледяном поле. Для этого случая дифференциальное уравнение имеет вид

$$\ddot{x} + A_4\dot{x}^2 = B_5, \quad B_5 = \frac{P_{\text{шпх}} - k_4}{(1 + k'_{11})D}. \tag{3}$$

Решения уравнений (1)—(3) приведены в работах [2, 3] с учетом начальных условий для каждого этапа циклического движения.

Вычисление коэффициентов полуэмпирических моделей по экспериментальным данным

Теоретические модели движения ледокола на различных этапах работы построены таким образом, что нуждаются в уточнении в соответствии с имеющимися данными натурных экспериментов. Это связано с тем, что во-первых, физические модели взаимодействия ледокола со льдом неизбежно упрощают реальность, а, во-вторых, математические модели получены для идеализированных условий. Поэтому перед составляющими сопротивления введены эмпирические коэффициенты $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$, $k_{\text{o}v}$, $k_{\text{р}}$, $k_{\text{ост}}$.

Коэффициенты, позволяющие приводить в соответствие теоретическую модель с данными натурных экспериментов, в представленной модели являются неизвестными величинами. Они могут быть определены на базе экспериментальных исследований по работе ледокола набегами [5—11].

Построение математических моделей производилось по экспериментальным данным [3, 4]. Несмотря на различные формы представления экспериментальных данных, все они являются уникальными и поэтому использованы для построения методик расчета движения ледоколов набегами, а именно для определения неизвестных коэффициентов $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$, $k_{\text{o}v}$, $k_{\text{р}}$, $k_{\text{ост}}$ полуэмпирической модели (1)—(3).

Расчет эмпирических коэффициентов $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$, $k_{\text{o}v}$, $k_{\text{р}}$, $k_{\text{ост}}$ следует производить, используя коэффициенты A_1, A_3, A_4, B_1, B_3, B_4, B_5 полуэмпирической модели (1)—(3) раздельно для каждого этапа движения ледокола набегами.

Рассмотрим процесс разгона ледокола в собственном канале и приведем системы уравнений для определения эмпирических коэффициентов битого льда $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$, которые получены на основе решений уравнений (1)—(3) относительно коэффициентов A_1, A_3, A_4, B_1, B_3, B_4, B_5.

В качестве исходных экспериментальных данных для нахождения эмпирических коэффициентов $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$ могут быть использованы время разбега $t_{\text{р}}$ и путь $l_{\text{р}}$, пройденный при разбеге. В этом случае система уравнений для нахождения эмпирических коэффициентов $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$ принимает вид

$$l_{\text{р}i} + \frac{1}{2A_{1i}} \ln\left(1 - \text{th}^2\left(t_{\text{р}i}\sqrt{A_{1i}B_{1i}}\right)\right) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n_1, \tag{4}$$

где i — номер текущего уравнения в системе; n_1 — число уравнений в системе, равное числу экспериментов с полученными данными $t_{\text{р}i}$, $l_{\text{р}i}$.

Если в качестве исходных экспериментальных параметров задаются длина разгонного участка $l_{\text{р}}$ и скорость $v_{\text{р}}$, с которой судно входит в лед, то система уравнений имеет вид

$$l_{\text{р}i} + \frac{1}{2A_{1i}} \ln\left(1 - \frac{v_{\text{р}i}^2 A_{1i}}{B_{1i}}\right) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n_2, \tag{5}$$

где n_2 — число уравнений в системе, равное числу экспериментов с полученными данными $l_{\text{р}i}$, $v_{\text{р}i}$.

В качестве исходных экспериментальных данных могут быть использованы такие данные, у которых запись параметров движения зафиксирована не полностью на всем этапе, а на определенном интервале времени. Система уравнений для определения $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$ в каждом случае принимает свой вид в зависимости от того, какие параметры приняты в качестве исходных:

– время разгона t и путь x, пройденный за это время:

$$x_i + \frac{1}{2A_{1i}} \ln\left(1 - \operatorname{th}^2\left(t_i\sqrt{A_{1i}B_{1i}}\right)\right) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n_3; \tag{6}$$

– время разгона t и скорость $\dot{x}$, которую ледокол развил за это время:

$$\dot{x}_i - \sqrt{\frac{B_{1i}}{A_{1i}}} \operatorname{th}\left(t_i\sqrt{A_{1i}B_{1i}}\right) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n_4; \tag{7}$$

– путь x и скорость $\dot{x}$, которую ледокол развил за этот пройденный путь:

$$x_i + \frac{1}{2A_{1i}} \ln\left(1 - \frac{\dot{x}_i^2 A_{1i}}{B_{1i}}\right) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n_5. \tag{8}$$

В (6)—(8) n_3—n_5 — число уравнений в системах, равное числу экспериментов с полученными данными: t_i и x_i, t_i и $\dot{x}_i$, x_i и $\dot{x}_i$ соответственно.

Для завершенного процесса $t = t_{\text{р}}$, $x = l_{\text{р}}$, $\dot{x} = v_{\text{р}}$ и уравнения (6), (8) принимают соответственно вид (4), (5).

При подборе исходных данных с непрерывной записью процесса в первую очередь следует ориентироваться на те параметры, которые непосредственно измерялись в эксперименте.

Составляя систему уравнений для нахождения коэффициентов $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$, можно использовать экспериментальные данные всех перечисленных категорий. При этом система уравнений будет состоять из уравнений вида (4)—(8); полное число уравнений в системе: $n = n_1 + n_2 + \ldots + n_5$.

Рассмотрим теперь процесс движения ледокола в сплошном ледяном покрове и приведем системы уравнений для определения эмпирических коэффициентов сплошного льда $k_{\text{o}v}$, $k_{\text{р}}$, $k_{\text{ост}}$.

1. Продвижение ледокола во льду до полной остановки. В этом случае в качестве исходных экспериментальных данных завершенного процесса могут быть использованы скорость входа в лед $v_{\text{р}}$, которую ледокол развил на этапе разбега, и путь продвижения во льду $l_{\text{п}}$. Тогда с учетом того, что время определяется из выражения $\dot{x} = f(t) = 0$, система уравнений принимает вид

$$l_{\text{п}j} + \frac{1}{2A_{4j}} \ln\left(\frac{B_{4j}}{B_{4j} + v_{\text{р}j}^2 A_{4j}}\right) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, m_1, \tag{9}$$

где j — номер текущего уравнения в системе; m_1 — число уравнений в системе, равное числу экспериментов с полученными данными $v_{\text{р}j}$, $l_{\text{п}j}$.

Если вместо скорости $v_{\text{р}}$ исходным считается время разбега $t_{\text{р}}$ перед входом ледокола в лед, то система уравнений принимает вид

$$l_{\text{п}j} + \frac{1}{2A_{4j}} \ln\left(\frac{A_{1j}B_{4j}}{A_{1j}B_{4j} + A_{4j}B_{1j}\operatorname{th}^2\left(t_{\text{р}j}\sqrt{A_{1j}B_{1j}}\right)}\right) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, m_2, \tag{10}$$

где m_2 — число уравнений в системе с полученными данными $l_{\text{п}j}$, $t_{\text{p}j}$; A_{1j} и B_{1j} определяются с учетом уже определенных эмпирических коэффициентов $k_{\text{ид}}$, $k_{\text{п}}$ для битого льда.

В качестве исходных экспериментальных данных незавершенного процесса (неполная запись) могут быть использованы несколько вариантов параметров движения, в зависимости от которых будет меняться вид системы уравнений для определения k_{ov}, k_{p}, $k_{\text{ост}}$:

– скорость входа в лед v_{p}, время движения во льду t и пройденный путь x:

$$x_j + \frac{1}{2A_{4j}} \ln\left(\frac{B_{4j}}{B_{4j} + v_{\text{p}j}^2 A_{4j}}\left(1 + \operatorname{tg}^2\left(\left(\frac{1}{\sqrt{A_{4j}B_{4j}}}\operatorname{arctg}\sqrt{\frac{v_{\text{p}j}^2 A_{4j}}{B_{4j}}} - t_j\right)\sqrt{A_{4j}B_{4j}}\right)\right)\right) = 0,$$
$$j = 1, 2, \ldots, m_3; \tag{11}$$

– скорость входа в лед v_{p}, время движения в сплошном льду t и скорость $\dot{x}$ в момент окончания записи экспериментальных данных t:

$$\dot{x}_j - \sqrt{\frac{B_{4j}}{A_{4j}}}\operatorname{tg}\left(\left(\frac{1}{\sqrt{A_{4j}B_{4j}}}\operatorname{arctg}\sqrt{\frac{v_{\text{p}j}^2 A_{4j}}{B_{4j}}} - t_j\right)\sqrt{A_{4j}B_{4j}}\right) = 0, \qquad j = 1, 2, \ldots, m_4, \tag{12}$$

где m_3, m_4 — число уравнений в системах (11) и (12), равное числу экспериментов с полученными данными $v_{\text{p}j}$, t_j, x_j и $v_{\text{p}j}$, t_j, $\dot{x}_j$ соответственно.

2. Продвижение ледокола в сплошном льду до некоторой установившейся скорости движения. В этом случае система уравнений формируется в зависимости от исходных параметров торможения ледокола:

– скорость входа в лед v_{p}, время торможения t и пройденный за это время путь x:

$$x_j + \frac{1}{2A_{4j}} \ln\left(\frac{B_{5j}}{B_{5j} - v_{\text{p}j}^2 A_{4j}}\left(1 - \operatorname{cth}^2\left(\left(t_j + \frac{1}{\sqrt{A_{4j}B_{5j}}}\operatorname{Arcth}\sqrt{\frac{v_{\text{p}j}^2 A_{4j}}{B_{5j}}}\right)\sqrt{A_{4j}B_{5j}}\right)\right)\right) = 0,$$
$$j = 1, 2, \ldots, m_5; \tag{13}$$

– скорость входа в лед v_{p}, время торможения t и установившаяся скорость движения $\dot{x}$:

$$\dot{x}_j - \sqrt{\frac{B_{5j}}{A_{4j}}}\operatorname{cth}\left(\left(t_j + \frac{1}{\sqrt{A_{4j}B_{5j}}}\operatorname{Arcth}\sqrt{\frac{v_{\text{p}j}^2 A_{4j}}{B_{5j}}}\right)\sqrt{A_{4j}B_{5j}}\right) = 0, \qquad j = 1, 2, \ldots, m_6, \tag{14}$$

где m_5, m_6 — число уравнений в системах (13) и (14), равное числу экспериментов с полученными данными $v_{\text{p}j}$, t_j, x_j и $v_{\text{p}j}$, t_j, $\dot{x}_j$ соответственно.

При составлении системы уравнений для нахождения коэффициентов k_{ov}, k_{p}, $k_{\text{ост}}$ можно использовать полный набор экспериментальных данных, перечисленных выше. В этом случае система уравнений будет состоять из уравнений типов (9)—(14). При этом полное число уравнений в системе: $m = m_1 + m_2 + \ldots + m_6$.

Эмпирические коэффициенты рассчитывались с использованием экспериментальных данных по речным ледоколам проектов Р-47, 1 191, 1 105 и диаграмм ледопроходимости по специально разработанным программам. Экспериментальные данные сразу по трем проектам использовались не случайно, а для максимального варьирования основных определяющих факторов, в частности толщины льда и коэффициентов формы корпуса ледоколов.

В описанных данных натурных экспериментов содержится менее полная информация по характеристикам льда, чем та, которая заложена в теоретических моделях. К недостающим характеристикам ледяного покрова относятся константы упругости E и μ, плотность льда $\rho_л$ и коэффициент трения f. В расчетах эмпирических коэффициентов они принимались равными среднестатистическим для речного льда: $E = 5 \cdot 10^6$ кПа; $\mu = 0{,}33$; $\rho_л = 0{,}9$ т/м^3; $f = 0{,}15$. Коэффициенты формы корпуса принимались для условной посадки ледокола до конструктивной ватерлинии; хотя в процессе эксплуатации посадка несколько изменяется, это не было зафиксировано в опытах. Невозможность прямого измерения сопротивления и тяги винтов в значительной степени ухудшает качество данных натурных экспериментов.

Для определения эмпирических коэффициентов было произведено обследование генеральной совокупности и путем выбраковки экспериментальных данных с наибольшими относительными расхождениями по длинам разбега и продвижения получены выборочные совокупности для определения эмпирических коэффициентов битого и сплошного льда, отобранные хотя и направленно, но, в конечном итоге, случайным образом.

Результаты расчетов эмпирических коэффициентов приведены в таблице.

На рис. 1, 2 приведено сравнение выборочных результатов натурных испытаний ледоколов на примере проектов 1 105 и 1 191, на основе которых были определены эмпирические коэффициенты $k_{ид}$ и $k_п$, с теоретическими зависимостями. Сравнение выборочных результатов натурных испытаний, на основе которых были определены k_{ov}, $k_р$, $k_{ост}$, с теоретическими зависимостями показано на примере проекта 1 105 на рис. 3, где h и $h_с$ — соответственно толщина льда и снега в метрах.

Из рис. 1—3 видно, что, хотя имеются некоторые расхождения результатов расчетов и экспериментов, расчеты по предложенным теоретико-экспериментальным моделям обеспечивают достаточную точность.

Значения эмпирических коэффициентов

Коэффициент	k_{ov}	$k_р$, кПа^2	$k_{ост}$	$k_{ид}$	$k_п$
Значение	3,71	$2{,}45 \cdot 10^6$	1,77	1,38	0,70

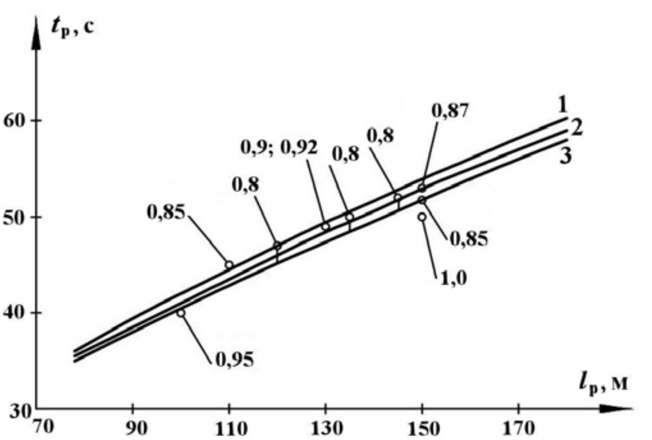

Рис. 1. Результаты теоретического расчета в сравнении с экспериментальными данными при движении ледокола в канале битого льда, проект 1 105: —— — теоретические кривые: 1 — $h = 1$ м; 2 — $h = 0{,}9$ м; 3 — $h = 0{,}8$ м; ○ — экспериментальные данные с указанием толщины льда в метрах

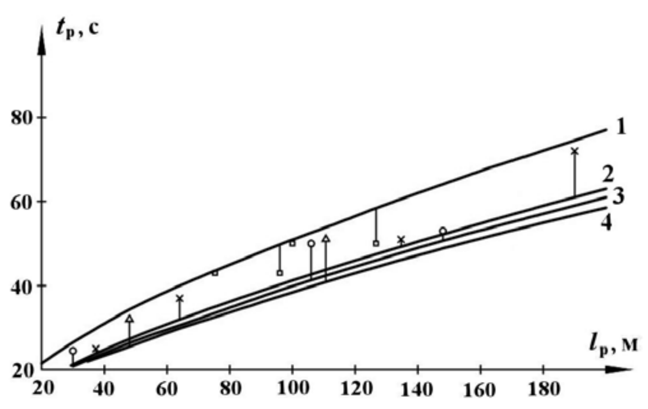

Рис. 2. Результаты теоретического расчета в сравнении с экспериментальными данными при движении ледокола в канале битого льда, проект 1 191: —— — теоретические кривые: 1 — $h = 1{,}8$ м; 2 — $h = 0{,}85 \div 0{,}91$ м; 3 — $h = 0{,}74 \div 0{,}76$ м; 4 — $h = 0{,}56 \div 0{,}57$ м; □ — эксперимент, $h = 1{,}8$ м; × — эксперимент, $h = 0{,}85 \div 0{,}91$ м; ○ — эксперимент, $h = 0{,}74 \div 0{,}76$ м; △ — эксперимент, $h = 0{,}56 \div 0{,}57$ м

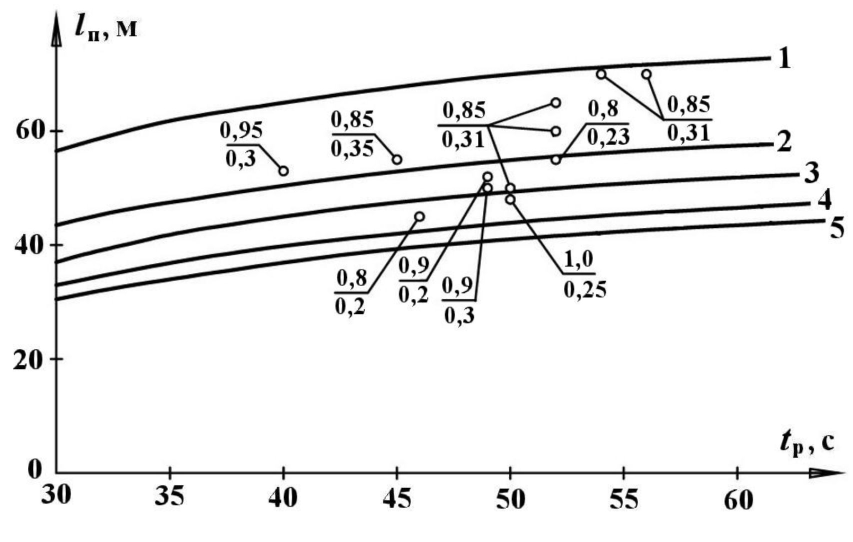

Рис. 3. Результаты теоретического расчета в сравнении с экспериментальными данными при движении ледокола в сплошном льду, проект 1 105: —— — теоретические кривые: 1 — $h/h_с = 0{,}8/0{,}23$; 2 — $h/h_с = 0{,}85/0{,}31$; 3 — $h/h_с = 0{,}9/0{,}3$; 4 — $h/h_с = 0{,}95/0{,}3$; 5 — $h/h_с = 1{,}0/0{,}25$; ∘ — экспериментальные данные с указанием $h/h_с$

Заключение

Показана эффективность применения предложенных методов использования проведенных и накопленных натурных данных для получения коэффициентов полуэмпирических моделей циклического движения набегами.

Расхождение результатов данных натурных экспериментов с теоретическими расчетами можно объяснить следующим образом. Натурные испытания проводились по схеме пассивного эксперимента, отсюда неточные измерения длин отходов, разбегов, продвижений ледокола, толщин льда и снега. При выводе расчетных формул значения толщины льда и снега были приняты постоянными, хотя в реальном процессе они колеблются. Не были учтены и зафиксированы изгибы реки, наличие течения, снос льда.

Следует отметить, что при накоплении данных натурных исследований эмпирические коэффициенты могут уточняться. Увеличение количества и повышение качества данных натурных экспериментов приводят к повышению точности $k_{ид}$, $k_п$, k_{ov}, $k_р$, $k_{ост}$, а следовательно, и методики расчета движения ледокола набегами.

Представленные результаты получены при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации по государственной поддержке ведущих научных школ РФ НШ-2485.2020.5.

Список литературы

1. *Грамузов Е. М., Калинина Н. В.* Исследования параметров движения ледоколов набегами. Оптимизация работы ледокола набегами // Проектирование, теория и прочность судов, плавающих во льдах: Межвуз. сб. трудов. Н. Новгород: НГТУ, 1995. С. 43—58.
   Gramuzov E. M., Kalinina N. V. Issledovaniya parametrov dvizheniya ledokolov nabegami. Optimizatsiya raboty ledokola nabegami // Proektirovanie, teoriya i prochnost sudov, plavayushchikh vo ldakh: Mezhvuz. sb. trudov. N. Novgorod: NGTU, 1995. S. 43—58.
2. *Зуев В. А., Грамузов Е. М., Калинина Н. В.* Ходкость речных ледоколов в тяжелых льдах // Вторая межд. конф. по судостроению — ISC'98. 24—26 ноября 1998 г. С.-Пб., 1998. С. 65—74.
   Zuev V. A., Gramuzov E. M., Kalinina N. V. Khodkost rechnykh ledokolov v tyazhelykh ldakh // Vtoraya mezhd. konf. po sudostroeniyu — ISC'98. 24—26 noyabrya 1998 g. S.-Pb., 1998. S. 65—74.

3. *Грамузов Е. М., Калинина Н. В., Солдаткин О. Б.* Отработка математической модели динамики движения речного ледокола в тяжелых ледовых условиях на базе натурных испытаний НГТУ. Деп. в ЦНИИ им. акад. А. Н. Крылова, 18.05.98 г., № ДР-3662.
   Gramuzov E. M., Kalinina N. V., Soldatkin O. B. Otrabotka matematicheskoy modeli dinamiki dvizheniya rechnogo ledokola v tyazhelykh ledovykh usloviyakh na baze naturnykh ispytaniy NGTU. Dep. v TsNII im. akad. A. N. Krylova, 18.05.98 g., № DR-3662.
4. *Грамузов Е. М., Калинина Н. В., Солдаткин О. Б.* Экспериментальное изучение движения речных ледоколов набегами // Межд. конф. "Проблемы прочности и эксплуатационной надежности судов". 9—12 сентября 1999 г. Владивосток, 1999. С. 188—196.
   Gramuzov E. M., Kalinina N. V., Soldatkin O. B. Eksperimentalnoe izuchenie dvizheniya rechnykh ledokolov nabegami // Mezhd. konf. "Problemy prochnosti i ekspluatatsionnoy nadezhnosti sudov". 9—12 sentyabrya 1999 g. Vladivostok, 1999. S. 188—196.
5. *Ионов Б. П., Грамузов Е. М.* Ледовая ходкость судов. 2 изд., исправленное. С.-Пб.: Судостроение, 2013.
   Ionov B. P., Gramuzov E. M. Ledovaya khodkost sudov. 2 izd., ispravlennoe. S.-Pb.: Sudostroenie, 2013.
6. *Каштелян В. И., Позняк И. И., Рывлин А. Я.* Сопротивление льда движению судна. Л.: Судостроение, 1968.
   Kashtelyan V. I., Poznyak I. I., Ryvlin A. Ya. Soprotivlenie lda dvizheniyu sudna. L.: Sudostroenie, 1968.
7. *Зуев В. А.* Средства продления навигации на внутренних водных путях. Л.: Судостроение, 1986.
   Zuev V. A. Sredstva prodleniya navigatsii na vnutrennikh vodnykh putyakh. L.: Sudostroenie, 1986.
8. *Тихонова Н. Е.* Оптимизация основных элементов и формы корпуса ледокола в зависимости от ледовых условий // Труды НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2014. № 5 (107). С. 302—308.
   Tikhonova N. E. Optimizatsiya osnovnykh elementov i formy korpusa ledokola v zavisimosti ot ledovykh usloviy // Trudy NGTU im. R. E. Alekseeva. 2014. № 5 (107). S. 302—308.
9. *Козин В. М., Жесткая В. Д., Погорелова А. В., Чижумов С. Д., Джабраилов М. Р., Морозов В. С., Кустов А. Н.* Прикладные задачи динамики ледяного покрова. М.: Академия естествознания, 2008.
   Kozin V. M.,Zhestkaya V. D., Pogorelova A. V., Chizhumov S. D., Dzhabrailov M. R., Morozov V. S., Kustov A. N. Prikladnye zadachi dinamiki ledyanogo pokrova. M.: Akademiya estestvoznaniya, 2008.
10. *Хейсин Д. Е.* Динамика ледяного покрова. Л.: Гидрометеорологическое изд-во, 1967.
   Kheisin D. E. Dinamika ledyanogo pokrova. L.: Gidrometeorologicheskoe izd-vo, 1967.
11. *Сазонов К. Е.* Оценка предельной толщины льда, преодолеваемой ледоколом при работе набегами // Судостроение. 2017. № 4 (833). С. 9—10.
   Sazonov K. E. Otsenka predelnoy tolshchiny lda, preodolovaemoy ledokolom pri rabote nabegami // Sudostroenie. 2017. № 4 (833). S. 9—10.

Статья поступила в редакцию 08.06.21.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Абузяров Мустафа Хасьянович — ННГУ им. Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: abouziar@mech.unn.ru
Анисин Андрей Владимирович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: AVAnisin@vniief.ru
Анисина Инга Михайловна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный сотрудник, *e-mail*: i_anisina@vniief.ru
Бочков Алексей Иванович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательского отдела, *e-mail*: AIBochkov@vniief.ru
Веселова Елена Александровна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: E.A.Veselova@itmf.vniief.ru
Глазова Елена Геннадьевна — ННГУ им. Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, старший научный сотрудник, *e-mail*: glazova@mech.unn.ru
Грамузов Евгений Михайлович — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, профессор кафедры, *e-mail*: terkor@nntu.ru
Дерюгин Юрий Николаевич — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, главный научный сотрудник, *e-mail*: YNDeryugin@vniief.ru
Зеленский Дмитрий Константинович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, заместитель начальника научно-исследовательского отдела — начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: DKZelenskiy@vniief.ru
Зуев Валерий Андреевич — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, заведующий кафедрой, *e-mail*: ship @nntu.ru
Калинина Надежда Викторовна — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, доцент кафедры, *e-mail*: nvk5133@mail.ru
Кочетков Анатолий Васильевич — ННГУ им. Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, главный научный сотрудник, *e-mail*: kochetkov@mech.unn.ru
Крылов Сергей Валерьевич — ННГУ им. Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: krylov@mech.unn.ru
Куркин Андрей Александрович — НГТУ им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород, проректор по научной работе, *e-mail*: aakurkin@gmail.com
Надёжин Сергей Станиславович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательского отдела, *e-mail*: SSNadezhin@vniief.ru
Певзнер Виктор Ошерович — ВНИИЖТ, г. Москва, главный научный сотрудник
Резчиков Василий Юрьевич — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: VYRezchikov@vniief.ru
Рыжачкин Иван Петрович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник, *e-mail*: IPRyzhachkin@vniief.ru
Соловьёв Вячеслав Петрович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, научный руководитель РФЯЦ-ВНИИЭФ — заместитель директора РФЯЦ-ВНИИЭФ по имитационному и виртуальному моделированию — директор института теоретической и математической физики, *e-mail*: VPSolovev@vniief.ru
Стенин Александр Михайлович — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, ведущий научный сотрудник
Сучкова Валентина Вадимовна — ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области, старший научный сотрудник
Третьяков Василий Владимирович — ВНИИЖТ, г. Москва, заведующий лабораторией
Третьяков Иван Владимирович — ВНИИЖТ, г. Москва, научный сотрудник

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Abuzyarov Mustafa Khasyanovich — NNSTU n. a. R. E. Alekseev, Nizhny Novgorod, leading scientist, *e-mail*: abouziar@mech.unn.ru

Anisin Andrey Vladimirovich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, head of research laboratory, *e-mail*: AVAnisin@vniief.ru

Anisina Inga Mikhaylovna — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, scientist, *e-mail*: i_anisina@vniief.ru

Bochkov Aleksey Ivanovich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, head of research department, *e-mail*: AIBochkov@vniief.ru

Veselova Elena Aleksandrovna — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, senior scietist, *e-mail*: E.A.Veselova@itmf.vniief.ru

Glazova Elena Gennadyevna — Lobachevsky University, Nizhny Novgorod, senior scientist, *e-mail*: glazova@mech.unn.ru

Gramuzov Evgeniy Mikhaylovich — NNSTU n.a. R.E. Alekseev, Nizhny Novgorod, professor of specialized department, *e-mail*: terkor@nntu.ru

Deryugin Yuriy Nikolaevich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, chief scientist, *e-mail*: YNDeryugin@vniief.ru

Zelenskiy Dmitriy Kostantinovich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, deputy head of the research department — head of research laboratory, *e-mail*: DKZelenskiy@vniief.ru

Zuev Valeriy Andreevich — NNSTU n. a. R. E. Alekseev, Nizhny Novgorod, head of a department, *e-mail*: ship @nntu.ru

Kalinina Nadezhda Viktorovna — NNSTU n. a. R. E. Alekseev, Nizhny Novgorod, assistant professor of specialized department, *e-mail*: nvk5133@mail.ru

Kochetkov Anatoliy Vasilyevich — Lobachevsky State University, Nizhny Novgorod, chief scientist, *e-mail*: kochetkov@mech.unn.ru

Krylov Sergey Valeryevich — Lobachevsky State University, Nizhny Novgorod, leading scientist, *e-mail*: krylov@mech.unn.ru

Kurkin Andrey Aleksandrovich — NNSTU n. a. R. E. Alekseev, Nizhny Novgorod, vice-principal on scholarly work, *e-mail*: aakurkin@gmail.com

Nadezhin Sergey Stanislavovich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, head of research department, *e-mail*: SSNadezhin@vniief.ru

Pevzner Viktor Osherovich — JSC VNIIZhT, Moscow, chief scientist

Rezchikov Vasiliy Yuryevich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, head of research laboratory, *e-mail*: VYRezchikov@vniief.ru

Ryzhachkin Ivan Petrovich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, senior scientist, *e-mail*: IPRyzhachkin@vniief.ru

Solovyev Vyacheslav Petrovich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod region, RFNC-VNIIEF's science leader, RFNC director deputy for Simulation and Modelling, director of Institute of Theoretical and Mathematical Physics, *e-mail*: VPSolovev@vniief.ru

Stenin Aleksandr Mikhaylovich — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, leading scientist

Suchkova Valentina Vadimovna — FSUE RFNC-VNIIEF, Sarov Nizhny Novgorod Region, senior scientist

Tretyakov Vasiliy Vladimirovich — JSC VNIIZhT, Moscow, head of laboratory

Tretyakov Ivan Vladimirovich — JSC VNIIZhT, Moscow, scientist

ПЕРЕЧЕНЬ

статей, опубликованных в 2021 г. в научно-техническом сборнике "Вопросы атомной науки и техники". Сер. "Математическое моделирование физических процессов"

Стенин А. М. Алгоритм решения систем линейных разностных уравнений на дробящихся ячейках сетки. Вып. 1. С. 3—16.

Лыков В. А., Лягина Е. Л., Шестаков А. А. Влияние спектральных эффектов переноса излучения в различных приближениях на развитие коротковолновых возмущений в мишенях инерциального термоядерного синтеза. Вып. 1. С. 17—28.

Соловьёв А. А. Точное решение одной модельной задачи об электромагнитных полях, генерируемых точечным источником гамма-квантов. Вып. 1. С. 29—38.

Анисов В. О., Вазиев Э. М., Ушаков Д. А. Реализация метода решения двумерного уравнения теплопроводности на гибридной архитектуре (CPU + GPU). Вып. 1. С. 39—52.

Николаева О. В. Методы распараллеливания вычислений при решении уравнения переноса нейтронов на неструктурированных сетках в программе "Радуга Т". Вып. 1. С. 53—67.

Ерзунов В. А., Бартенев Ю. Г. Адаптация решателя к потоку СЛАУ. Вып. 1. С. 68—79.

Иванов К. В., Галкин М. В., Сайфуллин А. И., Сайфуллина Р. Н., Девятых Д. В. Проблемы создания инструментальных средств программирования логики поведения агентов в мультиагентных системах имитационного моделирования двухсторонних боевых действий. Вып. 1. С. 80—89.

Шагалиев Р. М., Бусалов А. А. Нелинейный согласованный метод (НС-метод) ускорения сходимости итераций для уравнения переноса. Вып. 2. С. 3—10.

Пепеляев М. П., Ириничев Е. А. Повышение алгебраического порядка точности ES_n-квадратуры. Вып. 2. С. 11—23.

Наумов А. О. Об одной форме искусственной вязкости тензорного вида для расчета трехмерных газодинамических течений. Вып. 2. С. 24—43.

Соколов С. С., Пушкарёв А. А., Мотлохов В. Н. Алгоритмы контроля скорости распространения фронта детонационной волны в методике ТИМ. Вып. 2. С. 44—55.

Мжачих С. В., Лапшина Ю. Н. Об одном локально комонотонном кубическом сплайне класса C^1. Вып. 2. С. 56—69.

Никитин В. А., Шурыгин А. В., Новиков И. Г., Егоров А. В., Соколов С. С., Панов А. И. Программный модуль генерации замкнутой поверхностной триангуляционной сетки в пакете программ "Логос". Вып. 2. С. 70—79.

УДК 519.6
РАЗНОСТНАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ЛУЧИСТОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ШЕСТИГРАННЫХ ЯЧЕЙКАХ СЕТКИ С ЛИНЕЙЧАТЫМИ ГРАНЯМИ / А. М. Стенин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 4. С. 3—23.

Представлена разностная схема решения трехмерного уравнения лучистой теплопроводности на структурированной сетке, состоящей из произвольных шестигранных ячеек с линейчатыми гранями. Последовательно придерживаясь изначально принятого соглашения о линейчатости граней ячейки, получены формулы для объема ячейки и вектора нормали в центре ее грани. Дается определение площади грани, через которую ячейка сетки обменивается теплом с соседними ячейками, основанное на понятии векторной, или ориентированной, площади линейчатой поверхности в трехмерном пространстве. Описан алгоритм вычисления тепловых потоков на гранях ячеек сетки. Получена линеаризованная система разностных уравнений для итерационного решения нелинейных уравнений теплового баланса (рис. — 8, список лит. — 20).

Ключевые слова: трехмерное уравнение лучистой теплопроводности, шестигранные ячейки сетки, линейчатые грани, нормаль к линейчатой грани, площадь грани, тепловые потоки на гранях ячеек.

УДК 539.3
ЧИСЛЕННАЯ МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ГАЗОВЫХ СТРУЙ С УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИМИ ПРЕГРАДАМИ / М. Х. Абузяров, Е. Г. Глазова, А. В. Кочетков, С. В. Крылов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 4. С. 24—40.

Излагается численная методика решения трехмерных задач взаимодействия высокоскоростных газовых струй с упругопластическими преградами. Методика построена на основе единого модифицированного разностного метода С. К. Годунова для расчета как энерговыделения при детонации и движения газа, так и динамического деформирования упругопластических преград. Методика реализует эйлерово-лагранжев подход с явным выделением подвижных контактных поверхностей с использованием многосеточных алгоритмов. Приводятся результаты численных исследований процесса образования газовой высокоскоростной струи в П-образных зарядах небольшого удлинения и ее взаимодействия с упругопластической стальной преградой. Численные результаты хорошо соответствуют известным экспериментальным данным (рис. — 14, табл. — 1, список лит. — 22).

Ключевые слова: численное моделирование, схема Годунова, повышенная точность, многосеточный подход, трехмерная задача, взрыв, детонация, высокоскоростные струи, упругопластическая преграда, взаимодействие, сравнение с экспериментом.

УДК 519.6

ОБ ОДНОМ СЧЕТНОМ ЭФФЕКТЕ НЕФИЗИЧНОГО ПРОГРЕВА ВЕЩЕСТВА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРЕНОСА ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ / А. И. Бочков, В. Ю. Резчиков, В. В. Сучкова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 4. С. 41—49.

При численном решении задач переноса теплового излучения могут проявляться различные сеточные и численные эффекты, которые не связаны с физикой моделируемых процессов и затрудняют правильную интерпретацию результатов расчетов. В статье рассмотрен счетный эффект, описание которого авторы не встречали в научной литературе. Этот счетный эффект нефизичного (не являющегося решением системы интегродифференциальных уравнений переноса излучения и не укладывающегося в рамки описания физического процесса) ускоренного прогрева вещества вызван сочетанием двух факторов: сильной анизотропии входящего потока излучения по направлениям полета частиц и особенностью некоторых разностных схем второго порядка точности. Приведена постановка одномерной модельной задачи, в которой наглядно проявляется счетный эффект, и установлены причины его возникновения. Для борьбы с обнаруженным эффектом предложено несколько модификаций расчетной схемы, которые позволяют практически полностью избавиться от артефактов в численном решении (рис. — 4, список лит. — 8).

Ключевые слова: перенос излучения, численное моделирование, счетный эффект.

УДК 519.6
МЕТОДИКА "ЛОГОС-ВОЛНА" РАСЧЕТА ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ С УЧЕТОМ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ПОДВИЖНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ / Е. А. Веселова, Ю. Н. Дерюгин, Д. К. Зеленский // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 4. С. 50—66.

Представлена методика параллельного расчета двумерных задач газовой динамики с теплопроводностью на геометрически адаптивных неструктурированных сетках. Геометрическая адаптация связана с выделением в решении основных особенностей, таких как ударные волны и контактные разрывы. Скорость движения разрывов и параметры на разрывах определяются из решения задачи Римана о распаде разрыва. Смещение внутренних узлов сетки определяется методом интерполяции по смещению граничных узлов.

Численный метод основан на методе расщепления, решении уравнений Эйлера явным методом на подвижной сетке и решении уравнения теплопроводности неявным методом на неподвижной сетке. Разностные уравнения получены дискретизацией исходных уравнений в интегральной форме квадратурными формулами прямоугольников. При решении уравнений Эйлера численные конвективные потоки определяются на основе решения задачи о распаде разрыва. Для повышения точности моделирования предраспадные параметры потока определяются с использованием линейной либо квадратичной реконструкции решения. В задачах со сферической симметрией с целью уменьшения немонотонности в численном решении применяется алгоритм доворота вектора скорости у предраспадных параметров потока. Тепловые потоки на гранях аппроксимируются по верхнему временному слою центральными разностями. Для решения неявных разностных уравнений используется итерационный метод Ньютона. Получающаяся в результате аппроксимации система линейных алгебраических уравнений относительно приращения температуры решается с использованием параллельных решателей из библиотеки PMLP. Возможности методики проиллюстрированы на ряде тестовых задач (рис. — 12, табл. — 2, список лит. — 18).

Ключевые слова: газовая динамика, теплопроводность, схема расщепления, разностная схема, подвижные сетки, распараллеливание вычислений, тестовые расчеты.

УДК 625.033.37
МОДЕЛЬ ДЕФОРМИРУЕМОСТИ ГРУНТОВОГО ОСНОВАНИЯ ЖЕЛЕЗНОДОРОЖНОГО ПУТИ ПРИ ПРОПУСКЕ БОЛЬШОГО КОЛИЧЕСТВА ПОЕЗДОВ С РАЗЛИЧНОЙ НАГРУЗКОЙ / А. В. Анисин, И. М. Анисина, С. С. Надёжин, В. О. Певзнер, В. П. Соловьёв, В. В. Третьяков, И. В. Третьяков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 4. С. 67—75.

Проведено исследование применимости модели стандартного линейного твердого тела к описанию деформации земляного полотна под поездной нагрузкой. Ранее было показано, что в частном случае циклической синусоидальной нагрузки на рельс модель стандартного линейного твердого тела хорошо описывает как деформацию грунта под нагрузкой, так и релаксацию грунта после снятия нагрузки. В настоящей работе проанализированы экспериментальные данные, полученные сотрудниками ВНИИЖТ на перегоне Ковдор—Пинозеро. Модель стандартного линейного твердого тела обобщена на случай произвольного вида функции нагрузки. Доказана применимость этой модели при неоднородной по глубине нагрузке. Предложены простые оценочные формулы для деформации грунта при прохождении одного или нескольких поездов в зависимости от количества и массы проходящих составов, а также релаксации пути после прохождения поезда. Полученная методика позволяет прогнозировать рост динамических отступлений в вертикальной плоскости при прохождении длинносоставных поездов, что необходимо для планирования выправочных работ (рис. — 8, список лит. — 3).

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

УДК 519.6
ВЕКТОРНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ "ЛОГОС-АЭРОГИДРО" СРЕДСТВАМИ БИБЛИОТЕК IAL / И. П. Рыжачкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 4. С. 76—82.

В рамках программного модуля "Логос-АэроГидро" пакета программ "Логос" для дискретизации уравнения Навье—Стокса без расщепления используется метод конечных объемов на неструктурированных сетках, приводящий к решению СЛАУ с мелкоблочной матрицей для нахождения нескольких взаимозависимых неизвестных в каждой ячейке сетки. При распараллеливании вычислительных алгоритмов решения СЛАУ используются технологии SSE2-SSE4.2 (Intel®LegacySSE), Intel®AVX, Intel®AVX512. Описываются разработанные в РФЯЦ-ВНИИЭФ библиотеки IAL, обсуждаются проблемы, связанные с созданием оптимизированных библиотек. Приводятся результаты применения библиотек IAL для векторной оптимизации программного модуля "Логос-АэроГидро" (рис. — 8, список лит. — 5).

Ключевые слова: векторная оптимизация, SSE, AVX, пакет программ "Логос".

УДК 629.124.791
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДАННЫХ НАТУРНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДВИЖЕНИЯ ЛЕДОКОЛА НАБЕГАМИ / Е. М. Грамузов В. А. Зуев, Н. В. Калинина, А. А. Куркин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. Вып. 4. С. 83—90.

Внимание к арктическому судоходству постоянно растет. Наиболее универсальным средством борьбы с ледовыми затруднениями является ледокольный флот. При эксплуатации ледоколов часто встречаются тяжелые ледовые условия, в которых невозможно двигаться непрерывным ходом, и ледоколы вынуждены прибегать к работе *набегами*. Этот способ движения в настоящее время наименее изучен. В его развитии важную роль играют теоретические и экспериментальные исследования, обобщение опыта эксплуатации ледоколов. Работа ледокола набегами представляет собой циклическое движение, каждый цикл которого складывается из этапов. Приведены нелинейные дифференциальные уравнения второго порядка, описывающие все этапы движения ледокола набегами, и их аналитические решения, полученные авторами ранее. Предложены методы использования данных, полученных в результате проведенных натурных экспериментов и накопленных ранее, для получения коэффициентов полуэмпирических моделей циклического движения набегами. Показана эффективность применения предложенных методов (рис. — 3, табл. — 1, список лит. — 11).

Ключевые слова: лед, движение ледокола набегами, математическое моделирование, полуэмпирическая модель, данные натурных экспериментов.

A DIFFERENCE SCHEME TO SOLVE 3D EQUATION OF RADIATION THERMAL CONDUCTIVITY ON HEXAHEDRAL CELLS WITH SINGLE-CURVED FACETS. / A. M. Stenin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2021. No 4. P. 3—23.

A difference scheme to solve 3D equation of radiation thermal conductivity on structured mesh is presented; it consists of random hexahedral cells with single-curved facets. Keeping to the presumption of initially accepted agreement on the ruled character of facets of a cell, the formulas for the volume of the cell and normal vector in the center of its facets are produced. The definition of the facet area through which the cell of the mesh has heat exchange with neighboring cells is provided; it is based on the concept of vector area, or oriented area, of a ruled surface in 3D. An algorithm for computing heat flows at the facets of cells of the mesh is described. A linearized system of difference equations for iteration solution of non-linear equations of thermal balance is produced.

Key words: 3D equation of radiation thermal conductivity, hexahedral cells of the mesh, single-curved facets, a normal to a single-curved facet, area of the facet, heat flows at the facets of cells.

A NUMERICAL METHOD TO SOLVE 3D PROBLEMS OF HIGH-VELOCITY GAS JET INTERACTION WITH ELASTOPLASTIC BARRIERS / M. Kh. Abuzyarov, E. G. Glazova, A. V. Kochetkov, S. V. Krylov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2021. No 4. P. 24—40.

A numerical method to solve 3D problems of high-velocity gas jet interaction with elastoplastic barriers is described. The method is based on the unified modified difference method by S. K. Godunov to compute both energy release at detonation and gas motion and dynamic deformation of elastoplastic barriers. The method realizes Eulerian-Langrangian approach with explicit identification of moving contact surfaces using multi-mesh algorithms. Results of numerical research on the process of high-velocity jet formation in Π-shaped charges with a small elongation and its interaction with elastoplastic steel barrier are provided. Thee numerical results agree well with the known experimental data.

Key words: numerical simulation, Godunov scheme, improved accuracy, multi-mesh approach, 3D problem, explosion, detonation, high-velocity jets, elastoplastic barrier, interaction, comparison with experiment.

ON ONE COUNT EFFECT OF UNPHYSICAL WARMING-UP OF THE MATERIAL WHEN MODELLING THERMAL RADIATION TRANSFER / A. I. Bochkov, V. Yu. Rezchikov, V. V. Suchkova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2021. No 4. P. 41—49.

Many different mesh and numerical effects can appear when solving thermal radiation transfer problems numerically. They are not related to the physics of the processes being modeled and impede correct interpretation of the computation results. The paper considers a computing effect that the authors have not found in scientific publications. This computing effect of not physical (it is not the solution of a system of integro-differential equations for radiation transfer and does not fit the frames of description of a physical process) accelerated warming-up of the material is caused by the combination of two factors: strong anisotropy of the incoming radiation flow in the directions of the particles travel and specific features of some difference schemes of the second order of accuracy. We describe 1D model problem where the computing effect reveals itself demonstrably; the causes why it occurs are found. Several modifications of computational scheme are offered to fight with the revealed effect. They allow getting rid of artefacts in numerical solution almost completely.

Key words: radiation transfer, numerical simulation, computing effect.

"LOGOS-WAVE" ("LOGOS-VOLNA") METHOD TO COMPUTE 2D GAS-DYNAMIC PROBLEMS WITH ACCOUNT FOR THERMAL CONDUCTIVITY ON MOVING UNSTRUCTURED GRIDS / E. A. Veselova, Yu. N. Deryugin, D. K. Zelenskiy // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2021. No 4. P. 50—66.

A method for parallel computations on 2D gas-dynamic problems with account for thermal conductivity on geometrically adaptive unstructured grids is described. Geometrical adaptation is related to identification of basic specific features in the solution such as shock waves and contact discontinuities. The motion velocity at discontinuities and parameters at discontinuities are found from solution of Riemann problem. Displacement of internal nodes of the mesh is determined with boundary-node-displacement interpolation method.

The numerical method is based on split method, on the solution of Eulerian equations explicitly on moving mesh and on the solution of heat-conductivity equation implicitly on immobile mesh. Difference equations are produced with discretization of initial equations in integral form with quadrature formulas of rectangles. When solving Eulerian equations, numerical convective flows are found on the basis of Riemann problem solution. Pre-discontinuity parameters of the flow are found using either linear or quadratic reconstruction of the solution to improve simulation accuracy. Algorithm of additional turn of the velocity vector of pre-discontinuity parameters of the flow is used in problems with spherical symmetry to decrease nonmonotonic character of numerical solution. Heat flows at the facets are approximated by the upper time layer with central differences. Iteration Newton method is used to solve implicit equations. The system of linear algebraic equations resulted from approximation is solved using parallel solvers from PMLP library when temperature increment is regarded. Possibilities of the method are illustrated on a number of benchmarks.

Key words: gas dynamics, heat conductivity, splitting scheme, difference scheme, moving meshes, computation parallelization, testing computations.

DEFORMABILITY MODEL OF SUBSIDENCE OF SOIL FOUNDATION OF THE RAILWAY TRACK WITH THROUGHPUT OF A LARGE NUMBER OF TRAINS OF DIFFERENT CAPACITY / A. V. Anisin, I. M. Anisina, S. S. Nadyezhin, V. O. Pevzner, V. P. Solovyev, V. V. Tretyakov, I. V. Tretyakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2021. No 4. P. 67—75.

A model of standard linear solid is studied as applied to the description of roadbed deformation when loaded with trains. Earlier it was shown that in a particular case of cyclic sinusoidal loads on the rail the model of standard linear solid describes well both the deformation of the ground under the load and relaxation of the ground after unloading. The paper analyzes experimental data obtained by specialists from VNIIZhT at Kovdor-Pinozero railway haul. The model of standard linear solid is extended to the case of a random form of loading function. Applicability of this model is proved in case of the load non-uniform in depth. Simple evaluating formulas are suggested for ground deformation when one or several trains pass there as a function of the number and the mass of passing train sets of cars, and for the railway track relaxation after the trains have passed. The produced method makes it possible to predict the growth of dynamic retreats in a vertical plane when long train sets of cars pass, which is necessary for planning lining works.

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

VECTOR OPTIMIZATION OF "LOGOS-AEROHYDRO" PROGRAM MODULE WITH TOOLS OF IAL LIBRARIES / I. P. Ryzhachkin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2021. No 4. P. 76—82.

Method of finite volumes on unstructured meshes is used for discretization of Navier-Stocks equation within "Logos-AeroHydro" module of "Logos" software package. It results into solution of SLAE with a small-block matrix to find several interdependent indeterminates in each cell of the mesh. During parallelization of computing algorithms to solve SLAE, SSE2-SSE4.2 (Intel®LegacySSE), Intel®AVX, Intel®AVX512 techniques are used. IAL libraries developed in RFNC-VNIIEF are described; the issues related to creation of optimized libraries are discussed. Implementation results for IAL libraries for vector optimization of "Logos-AeroHydro" module are provided.

Key words: vector optimization, SSE, AVX, "Logos" software package.

USE OF FULL-SCALE EXPERIMENT DATA TO BUILD A SEMI-EMPIRICAL MODEL WHEN THE ICEBREAKER MOVES WITH INCURSIONS / E. M. Gramuzov, V. A. Zuev, N. V. Kalinina, A. A. Kurkin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2021. No 4. P. 83—90.

Attention to arctic maritime traffic is growing. The most universal means to fight ice hurdles is icebreaking fleet. Heavy ice conditions are frequent at operation of icebreakers when it is impossible to move continuously. So, icebreakers have to move in incursions. This type of motion is currently studied most poorly. Theoretical and experimental research and generalization of the operational experience for icebreakers play an important role in the development of the study. When the icebreaker operates in incursions (irruptions), it is a cyclic movement, and each cycle consists of stages. Nonlinear differential equations of the second order are presented; they describe all motion stages when the icebreaker operates with incursions. Their earlier produced analytical solutions are provided. Methods to use data produced in the course of full-scale experiments and accumulated earlier are offered to obtain coefficients of semi-empirical models of cyclic motion in incursions. We show the implementation efficiency of the proposed methods.

Key words: ice, movement of the icebreaker in incursions, mathematical simulation, semi-empirical model, data of full-scale experiments.