

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

**Математическое моделирование
физических процессов**

ВЫПУСК 2

2010

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 2

Издается с 1978 г.

Саров — 2010

Главный редактор Р. М. Шагалиев

Редакционная коллегия:

Ю. Г. Бартенев (ВНИИЭФ), Ю. А. Бондаренко (ВНИИЭФ) — зам. главного редактора,
А. Н. Быков (ВНИИЭФ), Н. Н. Залялов (ВНИИЭФ), А. Д. Зубов (ВНИИТФ),
Н. В. Иванов (ВНИИЭФ), В. Л. Ковалев (МГУ), М. Ю. Козманов (ВНИИТФ),
В. Е. Неуважаев (ВНИИТФ), Е. В. Соколовская (ВНИИЭФ) — ответственный секретарь,
А. А. Соловьев (ВНИИЭФ), В. Ф. Спиридонов (ВНИИЭФ),
В. Ф. Тишкин (ИММ РАН) — зам. главного редактора, А. А. Холостов (ВНИИЭФ),
А. Н. Чекалин (Казанский ГУ), В. Н. Чубариков (МГУ)

УДК 519.6

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СЧЕТНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ВЗРЫВЧАТОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ВВ ПО КИНЕТИКЕ МК В МЕТОДИКЕ ЛЭГАК

Н. А. Володина, И. Ю. Мышкина, В. Ф. Спиридонов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

При численном моделировании процесса развития и распространения детонации по методике ЛЭГАК отработана технология проведения расчетов с кинетикой МК на лагранжево-эйлеровых сетках. Изучено поведение результатов расчетов с кинетикой МК на последовательно сгущающихся сетках. Исследовано влияние на численное решение временного шага, типа счетной квадратичной вязкости, алгоритма расчета термодинамических параметров смешанных ячеек.

Проведено исследование по уточнению параметров модели кинетики МК для ВВ типа ТАТБ. Приводятся результаты расчетов одномерных и двумерных задач, а также их сравнение с экспериментальными данными, полученными в ИФВ ВНИИЭФ.

Ключевые слова: методика ЛЭГАК, кинетическая модель детонации МК, уравнение состояния ВВ.

Введение

Модель кинетики детонации МК [1, 2], разработанная группой авторов под руководством В. Г. Морозова, широко используется при численном моделировании процессов взрывчатого разложения ВВ по методике ЛЭГАК [3, 4]. Одной из особенностей кинетики детонации МК является зависимость выгорания ВВ от давления и плотности на фронте ударной волны (УВ). В силу тех или иных особенностей разностных схем (способ выделения ударного скачка, дисперсионные и диссипативные свойства и т. д.), используемых в различных численных методиках, некоторые параметры кинетики, особенно отвечающие за вычисление выгорания на фронте, зависят от счетных параметров — размера сетки, временного шага, счетной вязкости и т. д.

Первоначально в методике ЛЭГАК параметры кинетики МК были подобраны для расчетов на счетных сетках из достаточно узкого диапазона в силу ограниченности ресурсов ЭВМ. Обычно размер стороны счетной ячейки составлял $h \approx 0,02 \div 0,01$ см. Временной шаг вырабатывался внешними по отношению к кинетике моделями (условие Куранта в газовой динами-

ке, условие на УВ и т. д.). В настоящий момент вычислительные ресурсы позволяют проводить расчеты на достаточно подробных счетных сетках ($h \approx 0,005 \div 0,001$ см), поэтому встал вопрос об исследовании поведения решения в расчетах с кинетикой МК на последовательно сгущающихся сетках.

Необходимо отметить особенности реализации кинетики МК в методике ЛЭГАК:

- использование в расчетах лагранжево-эйлеровых и эйлеровых сеток;
- возможность использования однокомпонентного и двухкомпонентного приближений для реагирующей смеси.

В настоящей работе особое внимание уделяется следующим важным вопросам:

- исследование зависимости получаемого решения от размера счетной сетки по пространству и по времени, определение максимально допустимых пространственного и временного шагов (значения шагов, при уменьшении которых результаты расчетов перестают меняться);
- влияние замыкающего соотношения в *смешанных* ячейках при распределении сжа-

тий компонентов для реагирующей смеси на лагранжевом этапе (двухкомпонентный подход);

- сопоставимость результатов расчетов на эйлеровой и лагранжевой сетках.

Исследование этих вопросов позволило выработать технологию проведения расчетов и дать рекомендации по выбору размера сетки, типа квадратичной вязкости, временного шага и т. д. при численном моделировании процессов детонации с кинетикой МК в комплексе программ ЛЭГАК.

Краткое описание модели кинетики детонации МК

В работе [1] приведено подробное описание модели кинетики МК, а в работе [2] приведено описание ее реализации в методике ЛЭГАК. Остановимся лишь на тех особенностях модели кинетики, которые необходимы при проведении исследований в данной работе.

Модель кинетики МК можно считать двухстадийной, так как часть слагаемых, входящих в уравнение для скорости реакции, отвечает за выгорание ВВ на фронте УВ, а остальные — за ее фронт. Первая стадия отвечает за формирование инициирующей УВ. На этой стадии определяется степень разложения ВВ; по окончании первой стадии она фиксируется и становится начальной степенью разложения ВВ для второй стадии.

Для методик, использующих алгоритмы *сквозного счета* УВ (в которых вводится счетная вязкость, приводящая к замене ударного разрыва плавным переходом), в том числе для методики ЛЭГАК, существует проблема явного выделения фронта УВ. Таким образом, из-за необходимости локализации невыделенных явно ударных разрывов и определения скачка давления возникает проблема адаптации кинетики МК к конкретной численной методике.

В силу двухстадийности кинетики МК необходимо для каждой счетной ячейки хранить признак фронта УВ, выгорание на фронте УВ и общее выгорание. В связи с этим в расчетах на лагранжево-эйлеровых и чисто эйлеровых сетках требуется переинтерполяция указанных величин при перестроении счетной сетки.

Для адекватного описания взрывчатого превращения в зоне химической реакции необходимо, чтобы на эту зону приходилось как минимум

5–10 счетных ячеек. Так, например, для ВВ на основе ТАТБ ширина зоны химической реакции в стационарной детонационной волне составляет ~ 1 мм, а для ВВ на основе октогена эта зона может составлять всего лишь 0,1 мм. То есть счетная сетка в зоне ВВ может зависеть от типа моделируемого ВВ и должна быть достаточно мелкой. Однако, с другой стороны, размер счетной сетки должен быть таким, чтобы обеспечивать проведение численного моделирования за разумные временные сроки. Таким образом, для моделей кинетики МК, как и для большинства других моделей детонации, выбор счетной сетки является актуальной задачей.

Введение ограничения на временной шаг

Расчеты, проведенные по методике ЛЭГАК с использованием кинетики МК, показали, что при численном моделировании процесса детонации ВВ важен размер как пространственного шага, так и временного.

Результаты численного исследования получены на задаче об инициировании ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ высотой 0,6 см. На рис. 1,а приведена начальная постановка расчета. Расчет проводился в плоской постановке на квадратной эйлеровой сетке. Пашка из высокочувствительного ВВ инициировалась в точке на оси слева. Процесс детонации рассчитывался в приближении идеальной детонации. Процесс взрывчатого превращения в ВВ типа ТАТБ моделировался с использованием кинетики детонации МК. На рис. 1,б приведен экспериментальный рентгено снимок из работы [2], демонстрирующий размер и форму прореагировавшей части ВВ.

При проведении расчетов на последовательных измельченных пространственных сетках было обнаружено увеличение зоны выгоревшего ВВ при уменьшении размера сетки h . Это хорошо видно, например, на задаче об инициировании ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ (рис. 2, см. также цветную вкладку).

Аналогичная ситуация наблюдается при уменьшении временного шага на фиксированной по размеру пространственной сетке. При этом чем больше размер ячейки, тем сильнее влияние временного шага.

На рис. 3 (см. также цветную вкладку) приведена зависимость зоны выгорания от размера временного шага для той же задачи на сетке с

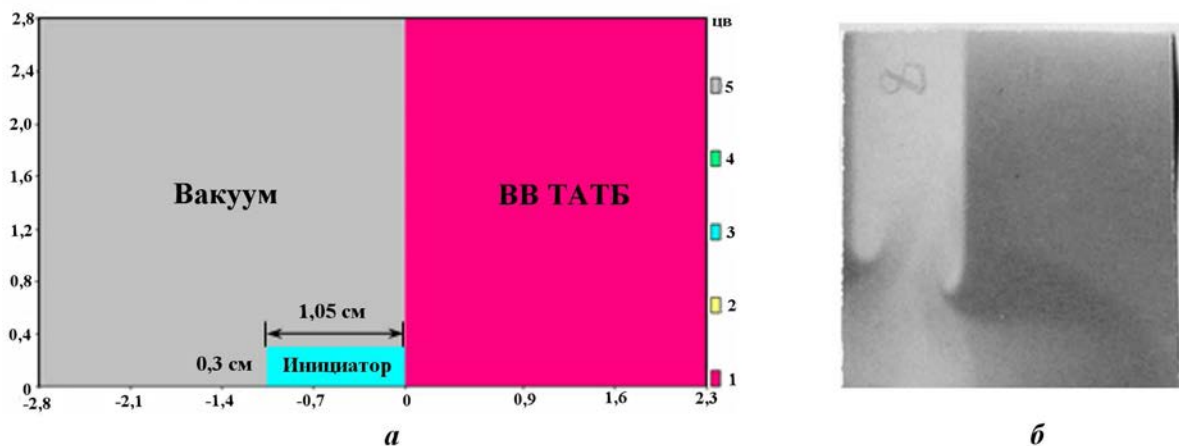


Рис. 1. Начальная постанровка расчета (а) и рентгеноснимок эксперимента (б) по иницированию ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ с поперечным размером 0,6 см

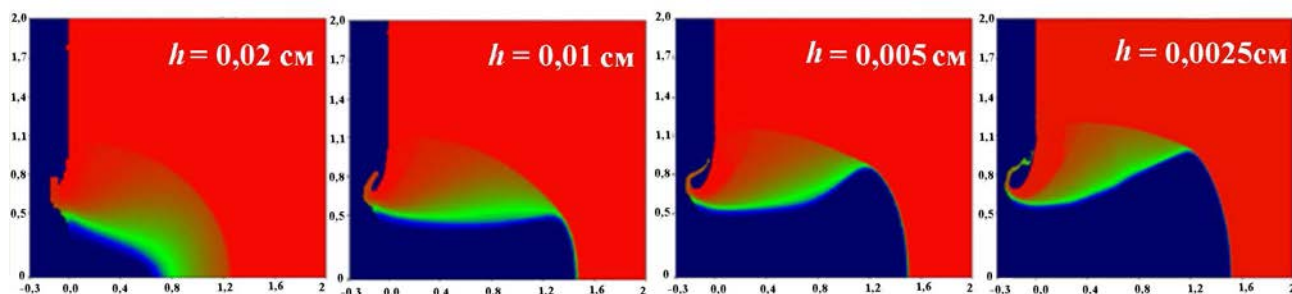


Рис. 2. Зависимость зоны выгорания ВВ от размера пространственной сетки h

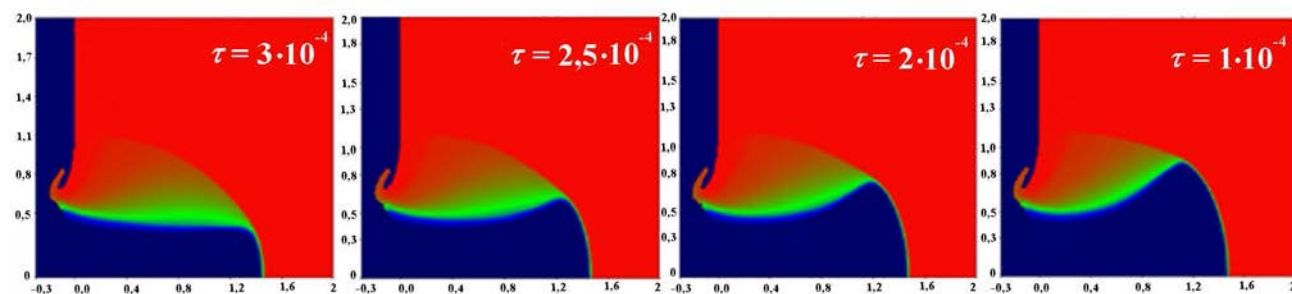


Рис. 3. Зависимость зоны выгорания ВВ от временного шага τ на пространственной сетке с $h = 0,01$ см

$h = 0,01$ см. Как видно из рисунка, при достижении определенного временного шага зона выгорания практически перестает меняться. Также расчеты показали, что при измельчении ячеек счетной сетки зависимость от временного шага начинает исчезать.

Эти факты указывают на то, что необходимо введение ограничения на временной шаг в расчетах с кинетикой МК функционально связанного с моделируемым процессом взрывчатого превращения.

Было опробовано два вида ограничения временного шага:

- 1) за счет ограничения выгорания ВВ на счетном шаге:

$$\tau_{new} = k_{\delta} \tau_{old} \frac{\delta}{\Delta W} \quad \text{при } \Delta W > \delta, \quad (1)$$

где τ_{new} — новое значение шага по времени; τ_{old} — старое значение шага по времени; k_{δ} — корректировочный коэффициент; δ — ограничитель роста выгорания ВВ; ΔW — изменение концентрации ВВ на одном шаге за счет кинетики. Если, например, $\delta = 0,04$,

то это означает, что за один временной шаг выгорание не должно превышать 4 %;

- 2) *типа условия Куранта*, когда шаг зависит от скорости нормальной детонации и имеет следующий вид:

$$\tau \leq k_D \frac{h}{D}, \quad (2)$$

где h — характерный размер ячейки; D — скорость нормальной детонации ВВ; k_D — корректировочный коэффициент. Если, например, $k_D = 0,5$, то при данном алгоритме обеспечивается прохождение ячейки детонационной волной не менее чем за два временных шага.

Для того чтобы выбрать, какой алгоритм ограничения на временной шаг предпочесть в расчетах с кинетикой МК, была проведена серия расчетов двух типов задач: расчета кривой Пополато и инициирования ВВ типа ТАТБ пашками из высокочувствительного ВВ с различными размерами поперечного сечения. В расчетах для каждого размера пространственной счетной сетки проводилась серия расчетов с постоянным шагом по времени. Временной шаг уменьшался от допустимых значений (из условия устойчивости газодинамической схемы) до значений, при которых результаты расчетов практически не меняются. Исследования проводились для квадратной эйлеровой сетки со стороной h (0,01 ÷ 0,001 см).

По совокупности всех расчетов для каждого размера счетной сетки выбирался максимально допустимый временной шаг, т. е. шаг, при дальнейшем уменьшении которого результаты расчетов не меняются. На рис. 4 представлена полученная зависимость максимально допустимого временного шага от размера счетной сетки.

Затем были подобраны параметры для обоих алгоритмов выбора счетного шага (в соответствии с ограничениями (1) и (2)) таким образом, чтобы при $h = 0,001$ см был получен ограничитель $\tau_{kin} = 0,2 \cdot 10^{-4}$ [10 мкс]. Так, для алгоритма выбора шага по выгоранию (формула (1)) было получено $\delta = 0,04$, а для алгоритма выбора шага по скорости детонации (формула (2)) было получено $k_D = 0,25$.

На рис. 4 приведены графики зависимости $\tau(h)$ для обоих алгоритмов расчета шага. Из рисунка видно, что алгоритм выбора шага типа курантовского (будем обозначать этот шаг

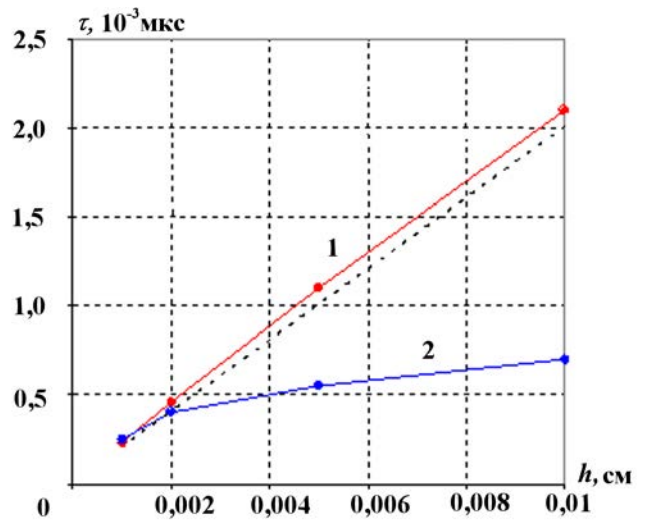


Рис. 4. Зависимость временного шага τ от пространственного h для расчетов с кинетикой МК: 1 — $\tau < 0,25h/D$; 2 — ограничение выгорания с $\delta = 0,04$; - - - по совокупности расчетов ($\tau \sim 0,02h$)

$\tau(h, D)$) практически обеспечивает совпадение с подобранной зависимостью, а алгоритм выбора шага по выгоранию ($\tau(h, \delta)$) занижает его. Хотя алгоритм выбора счетного шага $\tau(h, \delta)$ целиком лежит в области допустимых счетных шагов и, возможно, является более правильным, но поставленная цель — выбрать максимально допустимый счетный шаг, и алгоритм выбора $\tau(h, D)$ полностью удовлетворяет принятым критериям. Дальнейшие расчеты показали применимость этого алгоритма.

На рис. 5 (см. также цветную вкладку) приведены результаты расчетов инициирования ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ с поперечным размером 0,6 см на последовательно измельчаемых пространственных сетках с использованием критерия ограничения счетного шага $\tau(h, D)$. Из рисунка видно, что при измельчении счетной сетки, начиная с $h = 0,01$ см, зона выгорания практически не меняется.

Выбор вида счетной квадратичной вязкости

Стандартно при проведении двумерных расчетов по методике ЛЭГАК для сквозного счета УВ используется квадратичная счетная вязкость Неймана—Рихтмайера

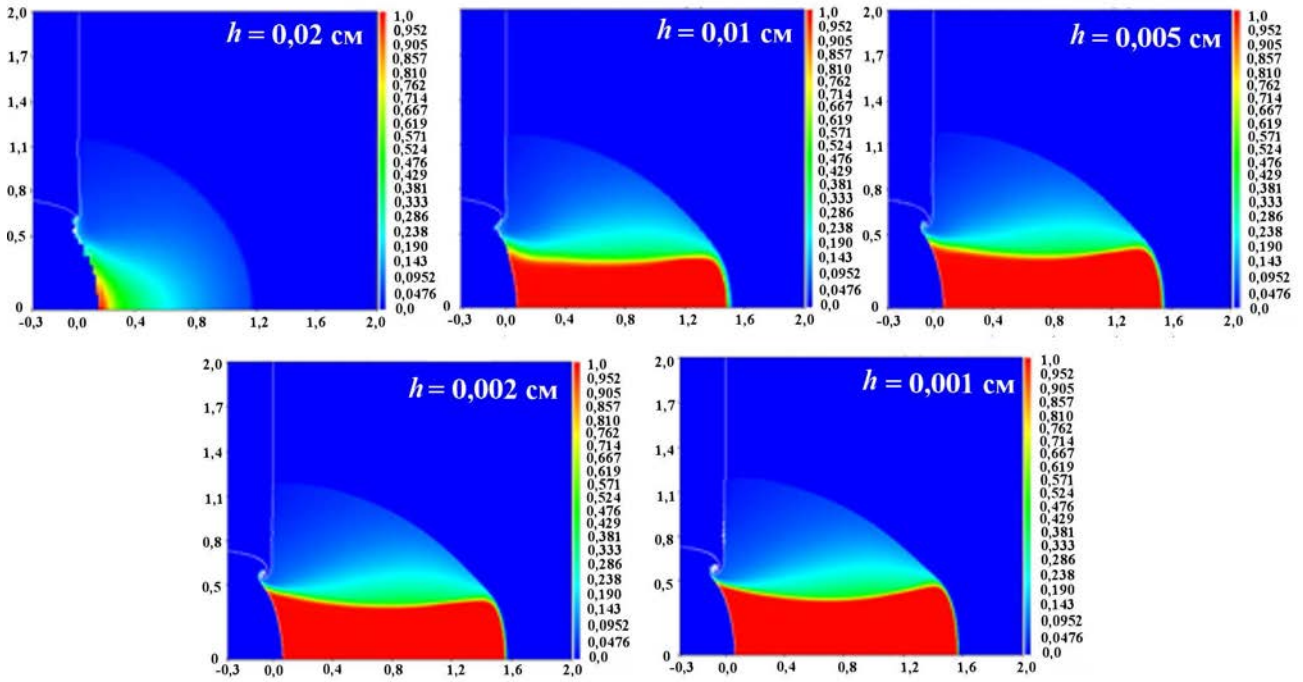


Рис. 5. Зависимость зоны выгорания ВВ от размера пространственной сетки h в расчете с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером

$$g = \begin{cases} \mu h^2 \frac{1}{\rho} \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2, & \text{если } \frac{d\rho}{dt} > 0; \\ 0, & \text{если } \frac{d\rho}{dt} \leq 0, \end{cases} \quad (3)$$

где h — характерный размер ячейки счетной сетки; μ — коэффициент, отвечающий за ширину зоны размазывания ударного скачка.

В методике ЛЭГАК разностная аппроксимация выражения (3) имеет вид

$$g = \begin{cases} \frac{\mu h^2 \rho^{n+1} (\rho^{n+1} - \rho^n)^2}{\rho^n (\rho^{n+1} + \rho^n)}, & \text{если } \rho^{n+1} > \rho^n; \\ 0, & \text{если } \rho^{n+1} \leq \rho^n; \end{cases} \quad (4)$$

в двумерном случае характерный размер ячейки определяется следующим образом:

$$h = S \sqrt{\frac{2}{l_1^2 + l_2^2}}, \quad (5)$$

где S — площадь ячейки, l_1 и l_2 — диагонали ячейки.

Использование такого вида квадратичной вязкости, например, в расчетах трехмерных задач приводит к нарушению симметрии сферических

течений на сферических сетках, так как характерный размер в пределах одного и того же сферического слоя не одинаков.

В расчетах с кинетикой МК на эйлеровой прямоугольной сетке (когда детонационная волна распространяется не ортогонально счетной сетке) также возникли проблемы при использовании неймановской вязкости (4) с выбором характерного размера по формуле (5). Они связаны с тем, что данный характерный размер ячейки не зависит от направления движения среды.

Так, используя неймановскую счетную вязкость, не удавалось подобрать параметры кинетики (A_0 и b , отвечающие за выгорание ВВ на фронте УВ) таким образом, чтобы зона выгорания в расчетах с инициирующей шашкой, $L = 0,6$ см, получалась близкой к затухающей. При измельчении счетной сетки ВВ типа ТАТБ начинало разгораться (рис. 6, см. также цветную вкладку). В расчетах с двухкомпонентной моделью для реагирующей смеси этот эффект проявлялся еще более ярко (рис. 7). Из рис. 7 видно, что вдоль оси симметрии детонация затухла, а под углом $\sim 45^\circ$ по диагонали ВВ горит.

Решение этой проблемы применительно к расчетам детонации — в использовании векторных квадратичных вязкостей, которые не зави-

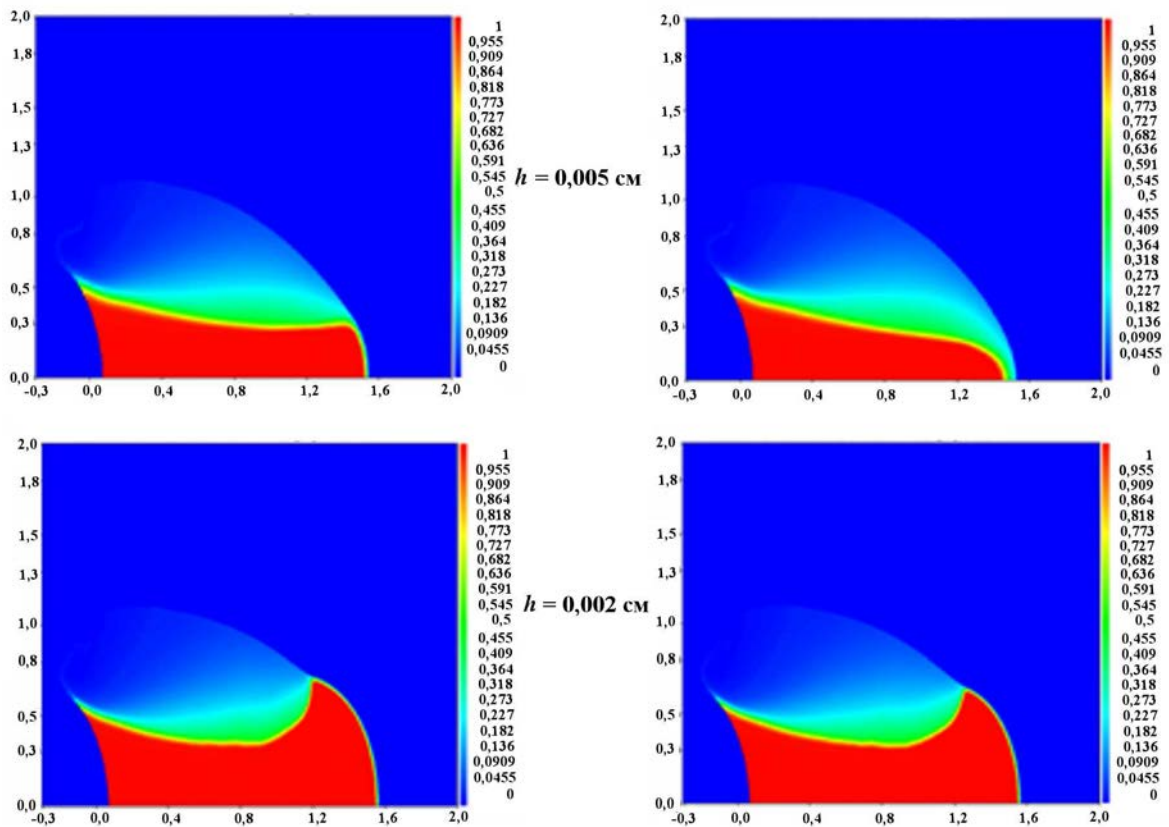


Рис. 6. Зоны выгорания ВВ в расчетах с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и неймановской квадратичной счетной вязкости: слева — $A_0 = 11,8$; справа — $A_0 = 11,7$

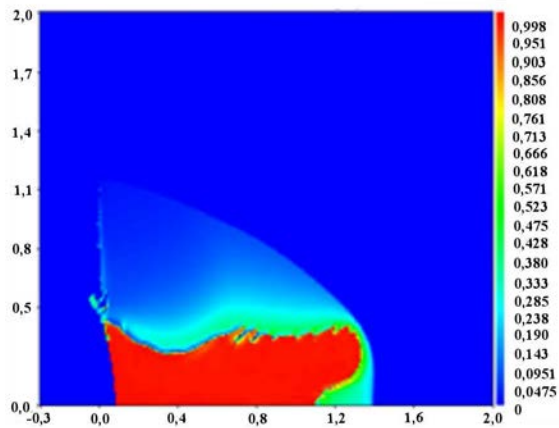


Рис. 7. Зоны выгорания ВВ в расчете с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и неймановской квадратичной счетной вязкости (двухкомпонентная модель для реагирующей смеси)

сят от характерного размера [5], либо *ориентированной* вязкости¹[6].

Были проведены серии тестовых расчетов с

¹Неймановская вязкость с ориентированным характерным размером, который вычисляется по деформациям ячейки в трех взаимноортогональных направлениях.

обоими типами квадратичных вязкостей (векторной и ориентированной), которые дали практически идентичные результаты. Однако по всей совокупности расчетов наилучшим образом зарекомендовала себя ориентированная вязкость, поэтому в дальнейших расчетах с кинетикой было решено использовать именно ее.

На рис. 5 приведены расчеты с инициирующей пашкой, $L = 0,6$ см, на последовательно сгущающихся сетках. Хорошо видно, что с использованием ориентированной вязкости, начиная с $h = 0,01$ см, зона выгорания ВВ ПБС практически не меняется.

Особенности реализации кинетики МК для расчетов на лагранжево-эйлеровой сетке

Однокомпонентная модель для реагирующей смеси. Стандартно в расчетах по методике ЛЭГАК с кинетикой МК для реагирующей смеси используется однокомпонентная модель [2]. По сути смесь ВВ + ПВ² является одним веществом, которое характеризуется дополнительным параметром W — концентрацией ВВ в реагирующей смеси. Такая модель называется *однокомпонентной*, ВВ и ПВ имеют общие термодинамические характеристики: плотность ρ , внутреннюю энергию e . Таким образом, в случае однокомпонентной среды уравнение состояния для реагирующего вещества (с учетом кинетики) является функцией трех независимых переменных ρ , e , W и давление для смеси ВВ и ПВ можно представить в следующем виде:

$$P = P(\rho, e, W) = WP_{ВВ}(\rho, e) + (1 - W)P_{ПВ}(\rho, e),$$

где $WP_{ВВ}(\rho, e)$ — вклад давления ВВ; $(1 - W) \times P_{ПВ}(\rho, e)$ — вклад давления ПВ.

При использовании такой модели для описания реагирующей среды для кинетики МК необходимо хранить три дополнительные (по отношению к газодинамическим) величины: W — концентрацию ВВ в реагирующей смеси; R_{ij} — признак фронта УВ; Φ_0 — выгорание ВВ на фронте первой УВ. Это связано с тем, что кинетика МК является двухстадийной и при расчете концентрации ВВ (W) необходимо выделять фронт УВ, т. е. различать ячейки, по которым идет УВ, и ячейки, расположенные за фронтом УВ, а также вычислять выгорание на фронте УВ (Φ_0), которое потом используется при вычислении выгорания за фронтом УВ.

Если расчет ведется на лагранжевой сетке, то никаких трудностей (кроме выделения фронта УВ и вычисления выгорания на этом фронте) больше не возникает, однако методика ЛЭГАК является лагранжево-эйлеровой и вещество в

различных состояниях (в частности, с признаком фронта УВ) может "перетекать" из одной ячейки в другую на эйлеровом этапе вычисления. В этом случае на эйлеровом этапе необходимо производить пересчет дополнительных величин кинетики, так как они связаны с веществом, а не с пространством. Массивы концентрации ВВ (W), выгорания ВВ на первой УВ (Φ_0) и признака первой УВ (R_{ij}) пересчитываются *на единицу массы вещества*, характеризующего реагирующую смесь.

Двухкомпонентная модель для реагирующей смеси. Наряду с однокомпонентной моделью для реагирующей среды в комплексе программ ЛЭГАК реализована и двухкомпонентная модель. В этом случае уравнение состояния для реагирующего вещества является функцией пяти независимых переменных: $\rho_{ВВ}$, $\rho_{ПВ}$, $e_{ВВ}$, $e_{ПВ}$, $\alpha_{ВВ}$ (или $\alpha_{ПВ} = 1 - \alpha_{ВВ}$). Тогда $\alpha_{ВВ}$ имеет смысл W , где $\alpha_{ВВ}$ — массовая концентрация ВВ. Давление для смеси ВВ и ПВ можно представить в следующем виде:

$$P = P(\rho_{ВВ}, \rho_{ПВ}, e_{ВВ}, e_{ПВ}, \alpha_{ВВ}) = \alpha_{ВВ}P_{ВВ}(\rho_{ВВ}, e_{ВВ}) + (1 - \alpha_{ВВ})P_{ПВ}(\rho_{ПВ}, e_{ПВ}).$$

При использовании двухкомпонентной среды для описания реагирующей смеси, на первый взгляд, возникает ряд преимуществ.

Во-первых, не нужно хранить дополнительную величину — выгорание для вычисления W , так как его заменяет концентрация ВВ — $\alpha_{ВВ}$. Также если, например, ввести дополнительные вещества для выделения реагирующей смеси на фронте УВ ($ВВ_1 + ПВ_1$), а реагирующую смесь за фронтом выделять другой парой веществ ($ВВ_2 + ПВ_2$), как это сделано в методике ЭГАК (код ЭГИДА-2D [7]), то отпадает необходимость в массиве признака R_{ij} положения фронта УВ. Таким образом, использование двухкомпонентной модели среды (разделение ВВ и ПВ на отдельные вещества) позволяет для кинетики МК использовать лишь одну дополнительную величину W_0 для запоминания выгорания на фронте первой УВ.

Во-вторых, для правильного описания переходных процессов в ВВ необходимо учитывать упругопластические свойства ВВ, в то время как для ПВ следует использовать газодинамическое приближение. В однокомпонентной модели это сделать крайне затруднительно, так как ВВ и ПВ являются по сути одним веществом.

²ПВ — продукты взрыва.

Однако наряду с преимуществами есть и ряд недостатков.

Во-первых, в методике ЛЭГАК для многокомпонентной среды на лагранжевом этапе стандартно используется модель относительной равносжимаемости компонентов. Однако известно, что эта модель является физически неверной в обширных смесевых областях (характерных как раз для переходных детонационных процессов) и ее следует применять лишь для течений с ярко выраженными контактными границами. Следовательно, для расчета процесса детонации более логично использовать модель равенства давлений [8]. К тому же авторы модели кинетики детонации МК утверждают, что процесс формирования *горячих пятен* происходит в предположении выравненного давления. Когда ВВ и ПВ рассчитываются в газодинамическом приближении, никаких проблем не возникает. Однако для более точного описания процессов, происходящих в ВВ, необходимо учитывать упругопластические свойства ВВ. В этом случае не совсем ясно, как использовать модель выравнивания давлений (возможно, будет достаточно выравнивать шаровую часть полного тензора напряжений, а девиаторную не изменять; возможно, необходимо выравнивать полные напряжения компонентов).

Далее, в расчетах по стандартной технологии в методике ЛЭГАК принят следующий алгоритм пересчета скоростей на эйлеровом этапе [9]: скорости при расчете конвективных потоков импульса центрируются всегда, за исключением смешанных ячеек и их окрестностей. То есть для смешанных ячеек (где непосредственно "работает" кинетика детонации) всегда используются донорные потоки импульса (аппроксимация с первым порядком). В расчетах это приводит к тому, что выгорание на эйлеровой сетке с $h = 0,01$ см (рис. 8,з) существенно ниже, чем на лагранжевой сетке с тем же размером ячеек (рис. 8,в), хотя для однокомпонентного приближения расчеты на лагранжевой (рис. 8,а) и эйлеровой (рис. 8,б) сетках, начиная с $h = 0,01$ см, практически совпадают.

Оказалось, что аналогичное совпадение результатов можно получить и для двухкомпонентной среды (рис. 9,а,б, см. также цветную вкладку), если при пересчете скоростей на эйлеровом этапе использовать алгоритм, при котором *скорости центрируются всегда* [9].

Из рис. 9,б также видно, что при использовании донорно-акцепторного алгоритма (метод

концентраций) зона смеси ВВ + ПВ имеет ровную зубчатую границу. Этот алгоритм включает в себя анализ вытекания веществ, который препятствует распространению смеси и обеспечивает локализацию контактных границ. Вообще это является положительным свойством алгоритма при расчете задач с ярко выраженными контактными границами, однако в расчетах течений со смесями это может приводить к *самолкализации* контактных границ (сепарации зоны смеси). Одним из способов решения этой проблемы является рассмотрение реагирующей смеси при анализе вытекания как одной компоненты, как, например, это сделано в работе [7]. Таким образом, для ячеек, в которых присутствуют вещества ВВ + ПВ, анализ вытекания для реагирующей смеси не делается. На рис. 9,в приведено поле выгорания ВВ с использованием *модифицированного алгоритма вытекания*. Хорошо видно, что зона перехода из ВВ в ПВ стала ровной и гладкой.

Сравнение двухкомпонентных моделей с разными замыкающими соотношениями для реагирующей смеси. Для сравнения действенности двух видов замыкающих соотношений (равносжимаемость и выравнивание давлений) применительно к реагирующей среде в расчетах с кинетикой МК проведена серия расчетов по моделированию процесса детонации в ВВ на основе ТАТБ, инициированного шашкой из высокочувствительного ВВ размером 6 мм, на последовательно сгущающихся сетках (рис. 10, см. также цветную вкладку).

Из рис. 10 видно, что результаты расчетов с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением *равносжимаемость* согласуются с экспериментальными данными и лагранжевыми расчетами на сетке $h = 0,005$ см, однако при измельчении счетной сетки происходит существенное уменьшение зоны полностью прореагировавшего ВВ. Возможно, это является подтверждением некорректности модели равносжимаемости для обширных смесевых зон.

Результаты расчетов на эйлеровой сетке с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением при определении сжатий компонентов на основе равенства давлений практически не изменяются, начиная с $h = 0,005$ см. Это свидетельствует о применимости данной модели для расчетов с кинетикой МК.

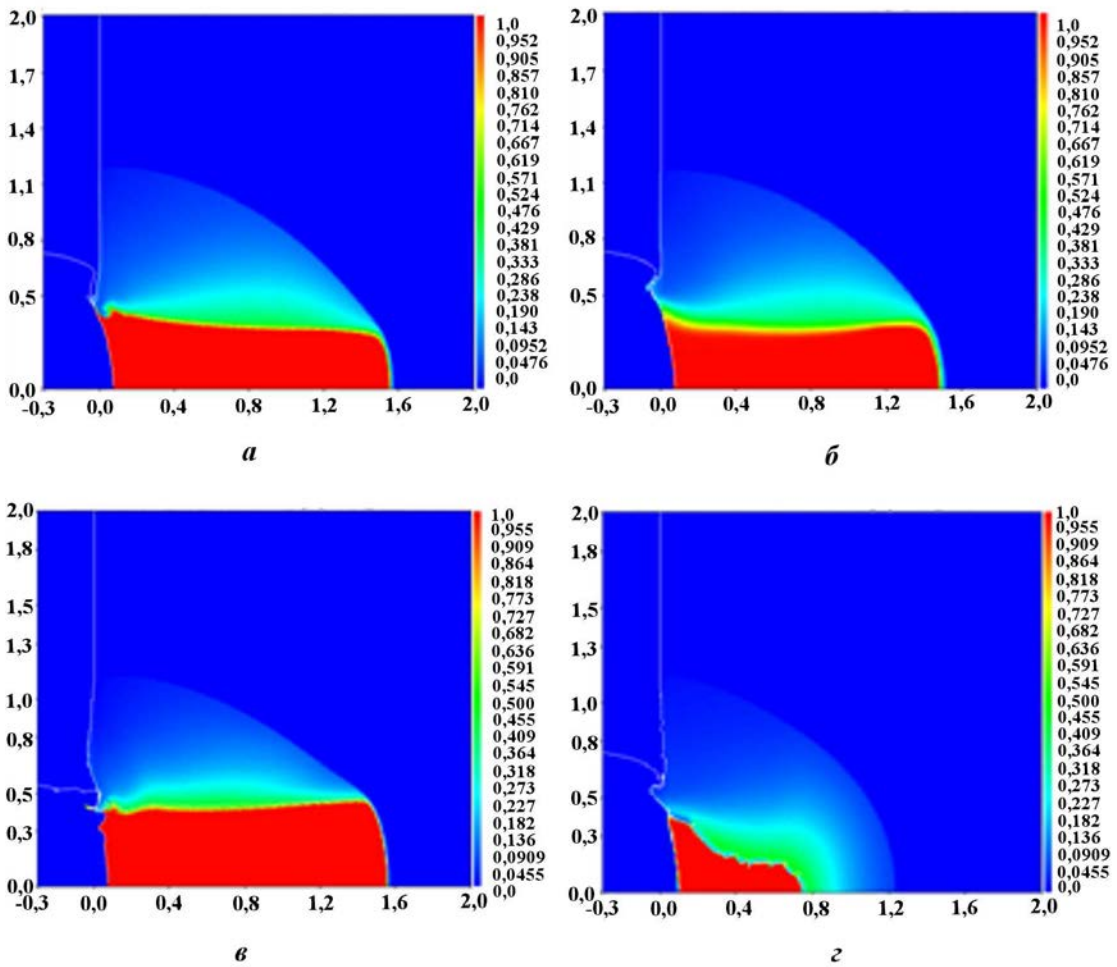


Рис. 8. Зоны выгорания ВВ в расчетах с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером; $h = 0,01$ см: *a* — лагранжева сетка, однокомпонентная модель; *б* — эйлерова сетка, однокомпонентная модель; *в* — лагранжева сетка, двухкомпонентная модель (равносжимаемость); *г* — эйлерова сетка, двухкомпонентная модель (равносжимаемость)

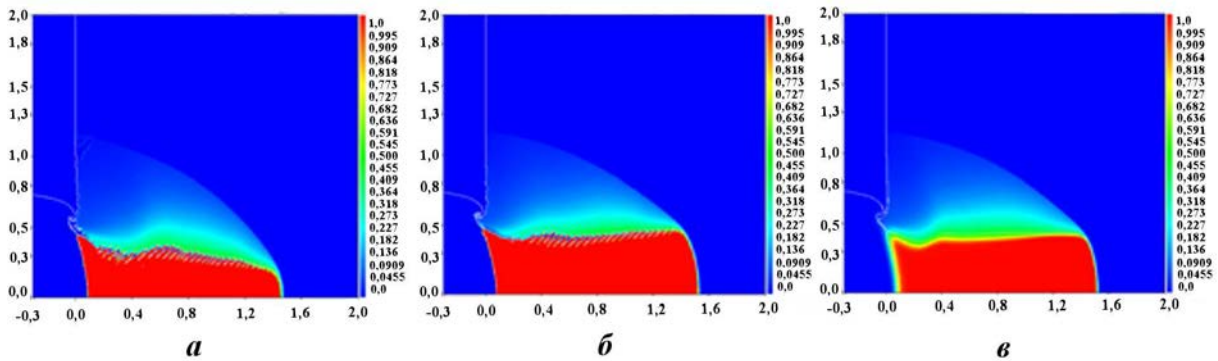
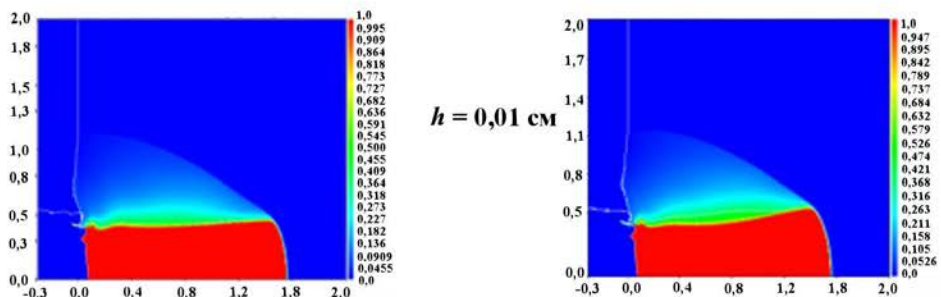


Рис. 9. Зоны выгорания ВВ в расчетах с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером; $h = 0,005$ см, эйлерова сетка, двухкомпонентная модель (равносжимаемость): *a* — центрирование потоков всегда, за исключением смешанных ячеек и их окрестностей; *б* — центрирование потоков; *в* — центрирование потоков, модифицированный метод с отключением анализа вытекания для смеси ВВ + ПВ

Лагранжева сетка



Эйлерова сетка

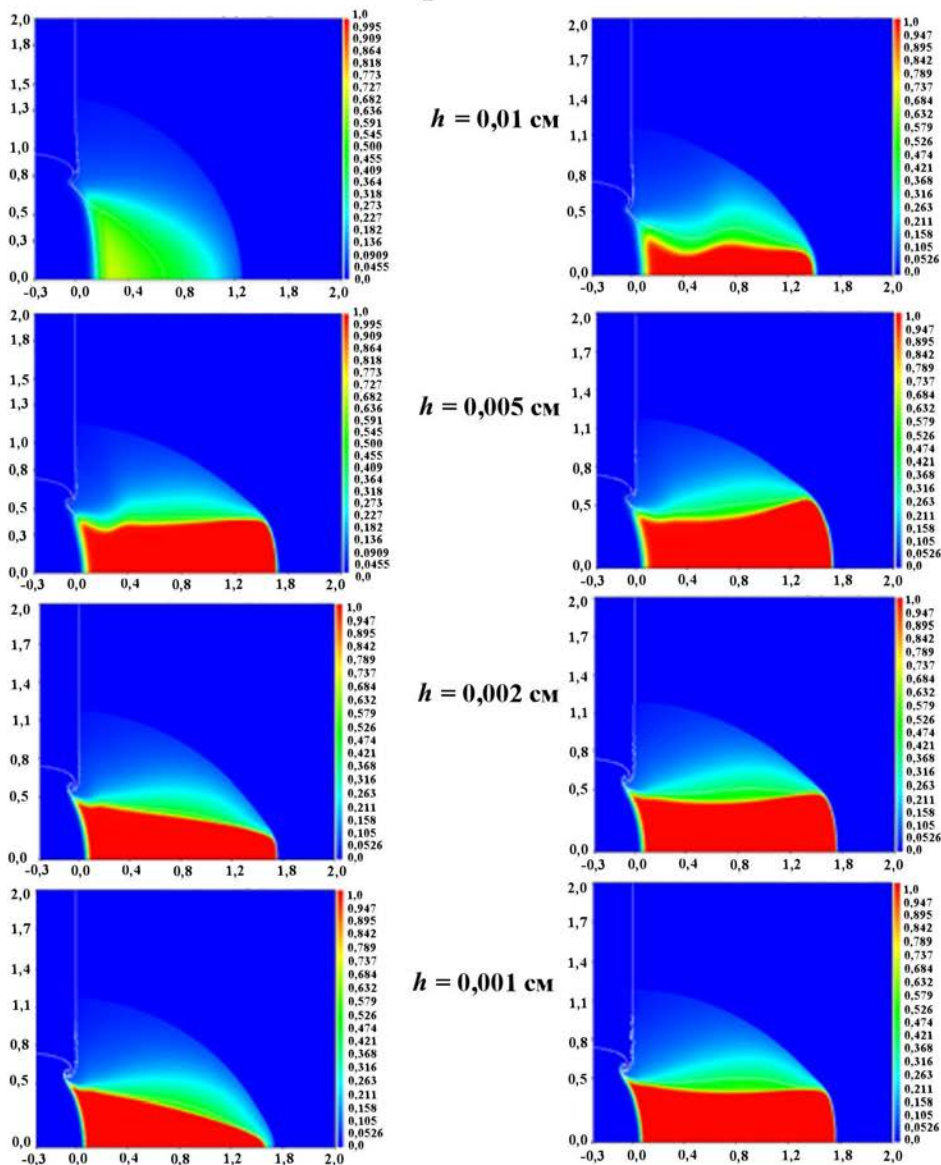


Рис. 10. Зависимость зоны выгорания ВВ от размера пространственной сетки h в расчете с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером в двухкомпонентном приближении: слева — равносжимаемость; справа — выравнивание давлений

О сравнимости результатов расчетов на лагранжевой и эйлеровой сетках

Из результатов расчетов, приведенных в данной работе, а также из опыта, накопленного авторами статьи можно сделать следующие выводы:

1. Расчеты с однокомпонентной моделью среды на эйлеровой сетке качественно описывают экспериментальные данные и согласуются с лагранжевыми расчетами, начиная с $h = 0,01$ см, хотя для достаточно интенсивных нагрузений допускается использование сеток с размером стороны ячейки $h = 0,02$ см.
2. Возможно, расчеты с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением *равно сжаиаемость* демонстрируют некорректность получаемых результатов на последовательно сгущаемых сетках.
3. Результаты расчетов с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением *равенство давлений* на эйлеровой сетке практически не изменяются, начиная с $h = 0,002$ см, однако качественное описание экспериментальных данных может быть получено и при $h = 0,005$ см. То есть в расчетах с двухкомпонентной моделью сетка должна быть мельче как минимум в 2 раза, чем в расчетах с однокомпонентной моделью, и в 4–5 раз по сравнению с лагранжевой сеткой.

Заключение

Таким образом, для проведения расчетов с кинетикой МК на лагранжево-эйлеровой сетке в методике ЛЭГАК выработана методика, которая включает в себя следующее:

- 1) использование квадратичной неймановской вязкости с ориентированным характерным размером, $\mu = 4$;
- 2) использование ограничения счетного шага типа курантовского с зависимостью от скорости детонации ВВ, $\tau \leq k_D \frac{h}{D}$, с коэффициентом $k_D = 0,25$;
- 3) рекомендации при проведении расчетов с двухкомпонентной моделью среды:
 - а) использовать замыкающее соотношение в виде равенства давлений компонентов: $P_{ВВ} = P_{ПВ}$;

- б) при пересчете скоростей на эйлеровом этапе всегда использовать центрированные скорости [9];
- в) при пересчете величин в ячейке, в которой присутствуют вещества ВВ+ПВ, не использовать анализ вытекания веществ (полагается, что текут все вещества).

Для предложенной технологии проведения расчетов были подобраны параметры кинетики МК, реализованной в методике ЛЭГАК, как для однокомпонентной модели среды, так и для двухкомпонентной (таблица). Подробное описание модели кинетики МК и ее параметров представлено в работе [2].

Проведенный в настоящей работе анализ результатов моделирования процессов детонации с использованием кинетики МК по методике ЛЭГАК поможет выполнить аналогичные исследования и для других методик, внедряющих эту модель кинетики ВВ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 08-01-00807).

Константы кинетики МК для ВВ на основе ТАТБ для разработанной технологии проведения расчетов по методике ЛЭГАК

Параметр	Однокомпонентная среда	Двухкомпонентная среда
a	0,02	0,02
b	95	98
A_0	14	16
$A_1, \text{ГПа}^{-2}$	0,08	0,13
$A_2, \text{ГПа}^{-2}$	0,005	0,005
$A_3, \text{ГПа}^{-2}$	2	2
$P_a, \text{ГПа}$	19	19
$P_{кр}, \text{ГПа}$	1	1
W_c	0,77	0,77

Список литературы

1. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Ольхов В. О. и др. Расчетное моделирование с опорой на эксперименты инициирования и развития детонации ВВ на основе ТАТБ с учетом десенсибилизации при взаимодействии ударной и детонационной волн: Препринт 37–95. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1995.
2. Бахрах С. М., Володина Н. А., Зайцева М. О. и др. Экспериментальное и числен-

- ное исследование развития процесса детонации ВВ типа ТАТБ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 1. С. 41—56.
3. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А. Метод расчета течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых координатах // Докл. АН СССР. 1984. Вып. 4. С. 829—833.
 4. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. и др. Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41—50.
 5. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Зайцева М. О., Тихонова А. П. Разностная схема расчета трехмерной лагранжевой газодинамики в комплексе ЛЭГАК-3D // Третья науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Сб. докл. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004. С. 77—82.
 6. Янилкин Ю. В., Шанин А. А., Ковалев Н. П. Комплекс программ ЭГАК для расчетов двумерных течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 4. С. 69—75.
 7. Код ЭГИДА-2D для моделирования двумерных задач: Уч. пособие. В 2 томах / Под ред. Ю. В. Янилкина. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2008.
 8. Гончаров Е. А., Янилкин Ю. В. Новый метод расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 3. С. 16—30.
 9. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф. Схема согласованной аппроксимации конвективных потоков в методике ЛЭГАК // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1988. Вып. 4. С. 38—43.

Статья поступила в редакцию 06.11.09.

УДК 519.6

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ИСКУССТВЕННОЙ ВЯЗКОСТИ ДЛЯ КОМПОНЕНТОВ СМЕШАННЫХ ЯЧЕЕК

Е. А. Гончаров, В. Ю. Колобянин, Ю. В. Янилкин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Рассматриваются несколько способов определения искусственной вязкости для компонентов в смешанных ячейках, содержащих два и более веществ. На тестовых задачах исследуется зависимость результатов расчетов от этих способов для трех методов замыкания уравнений газовой динамики, использующих соответственно следующие предположения: равенство дивергенций скоростей компонентов; равенство приращений давлений компонентов; равенство массовых скоростей компонентов после прохождения малого возмущения.

Ключевые слова: методика ЭГАК, газовая динамика, методы замыкания уравнений газовой динамики, искусственная вязкость.

Введение

Система уравнений газовой динамики в лагранжевых переменных в задачах со смешанными ячейками, содержащими два и более веществ (компонентов) гетерогенной смеси, не замкнута. В ней не определены среднее давление в смешанной ячейке, распределение полной дивергенции скорости (далее просто дивергенции) ячейки по компонентам, искусственная вязкость q ячейки и искусственные вязкости q_i компонентов. Для замыкания системы необходимы дополнительные предположения.

В настоящее время известно несколько методов замыкания уравнений газовой динамики в лагранжевых переменных для случая гетерогенной смеси [1–7], позволяющих однозначно определять общие давления и дивергенции для компонентов. В работе [8] проведено перекрестное сравнение эффективности и точности этих методов замыкания. Однако в указанной работе осталась не исследованной зависимость результатов расчетов от способов определения искусственной вязкости для компонентов, при этом сравнение методов распределения дивергенции по компонентам сделано при отличающихся способах определения искусственных вязкостей компонентов в каждом из методов. Отметим, что от способа вычисления вязкостей компонентов зависит распределение диссипируемой в ячейке энергии по веществам.

Основная цель данной работы — исследование влияния разных видов вязкости компонентов в смешанных ячейках на результаты тестовых расчетов.

В работе [8] из пяти рассмотренных методов распределения дивергенции ячейки по компонентам выделены три метода, основанных:

- на равенстве дивергенций компонентов [2] (для краткости ниже этот метод будем называть *метод 1*);
- предположении о равенстве приращений давлений компонентов [1, 5] (*метод 2*);
- равенстве массовых скоростей компонентов после прохождения малого возмущения [7] (*метод 3*).

В данной работе тестовые расчеты и вариации способов определения искусственной вязкости для компонентов проводились с использованием только этих методов распределения дивергенции ячейки по компонентам, так как именно они являются основными используемыми методами замыкания в

методике ЭГАК [9], по которой проводились все расчеты. Отметим, что в эйлеровых расчетах для вычисления конвективных потоков в смешанных ячейках использовался донорный метод.

О возможных способах определения искусственных вязкостей компонентов

Вводная часть. В работе [1] показано, что для выполнения условия аддитивности удельной внутренней энергии компонентов (изменение полной энергии ячейки должно равняться сумме изменений энергий компонентов) достаточно, чтобы среднее давление и средняя искусственная вязкость ячейки вычислялись по формулам

$$\begin{aligned}\bar{P} &= \sum_i \beta_i \xi_i P_i; \\ \bar{q} &= \sum_i \beta_i \xi_i q_i,\end{aligned}\tag{1}$$

где β_i — объемная концентрация i -го компонента; ξ_i — коэффициенты в распределении дивергенции ячейки по компонентам ($\text{div } \vec{u}_i = \xi_i \text{div } \vec{u}$). При этом для значений β_i и ξ_i выполняются условия $\sum_i \beta_i = 1$ и $\sum_i \beta_i \xi_i = 1$.

До недавнего времени основными методами распределения дивергенции ячейки по компонентам являлись метод, основанный на равенстве дивергенций компонентов [2], и метод, использующий предположение о равенстве давлений компонентов [3] (его реализация в методике ЭГАК описана в работе [4]). В последние годы в ряде работ [1, 5–7] предложено несколько новых методов распределения дивергенции смешанной ячейки по компонентам.

Отметим, что все новые методы замыкания содержат безытерационные алгоритмы выравнивания давлений компонентов. При решении уравнения движения к среднему давлению добавляется средняя по ячейке квадратичная искусственная вязкость Неймана следующего вида:

$$\bar{q} = \begin{cases} A\bar{\rho}(h \text{div } \vec{u})^2, & \text{если } \text{div } \vec{u} < 0; \\ 0, & \text{если } \text{div } \vec{u} > 0.\end{cases}\tag{2}$$

Здесь A — некоторая константа, от ее значения зависит количество ячеек, на которые *размазывается* разрыв на ударной волне (УВ); $\bar{\rho}$ — средняя плотность в ячейке; h — характерный размер ячейки.

Однако определение искусственных вязкостей компонентов представляет собой неоднозначную задачу, для корректного решения которой обычно не достаточно данных о подсеточном поведении компонентов. При довольно большом разнообразии методов замыкания уравнений газодинамики, связанных с вычислением дивергенций компонентов и средних давлений, практически нет работ, посвященных определению искусственных вязкостей компонентов. Из немногих укажем работу [2], в которой предлагается использовать для компонентов искусственную вязкость в виде (2) со своими величинами ρ_i , h_i и общей $\text{div } \vec{u}$, и работу [5], в которой используется вязкость с величинами ρ_i , h и $\text{div } \vec{u}_i$.

От способов определения искусственных вязкостей компонентов зависит распределение по компонентам энергии, диссипируемой в ячейке при прохождении УВ. При этом выполнение закона аддитивности энергии обеспечивается условием (1). Проблема распределения этой энергии по компонентам является подсеточной задачей, в которой отсутствует полная информация, необходимая для получения точного решения. В реальности ширина фронта УВ обычно намного меньше размеров счетных ячеек, и поэтому по каждому из веществ гетерогенной смеси УВ проходит фактически независимо. При этом параметры УВ в каждом веществе различны и отличаются от средних величин смешанных ячеек, и однозначно определить долю диссипируемой энергии для каждого компонента практически невозможно. После прохождения УВ давления и массовые скорости компонентов различны и процессы релаксации давления и массовых скоростей дополнительно перераспределяют диссипируемую энергию по компонентам.

При рассмотрении способов определения искусственных вязкостей компонентов будем характеризовать эти способы распределением диссипируемой в ячейке энергии по компонентам и изменением за счет этого давления компонентов на счетном шаге.

В соответствии с разностной схемой методики ЭГАК приращение удельной внутренней энергии компонента за счетный шаг по времени, связанное с искусственной вязкостью, определяется по формуле

$$\Delta e_i = -\frac{q_i^n}{\rho_i^n} \xi_i^n \operatorname{div} \vec{u}^{n+1/2} \tau, \quad (3)$$

где τ — шаг по времени, а верхний индекс обозначает номер временного слоя.

Изменение давлений компонентов на счетном шаге за счет искусственной вязкости получим следующим образом.

Для адиабатических течений справедливо

$$\begin{aligned} \Delta P &\approx \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S \Delta \rho \approx -\tau \rho c^2 \operatorname{div} \vec{u}, \\ \Delta \rho &\approx -\tau \rho \operatorname{div} \vec{u} \end{aligned} \quad (4)$$

(c — скорость звука).

Полное изменение давления на счетном шаге, используя уравнение состояния (УРС) $P = P(\rho, e)$, в общем случае можно представить в виде

$$\Delta P \approx \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e \Delta \rho + \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho \Delta e. \quad (5)$$

Для адиабатических течений приращение энергии запишем в виде

$$\Delta e = -\tau \frac{P}{\rho} \operatorname{div} \vec{u}.$$

Подставляя данное выражение в (5) и сравнивая с (3), с учетом (4) получаем

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e + \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho \frac{P}{\rho^2} = c^2.$$

При прохождении УВ приращение энергии вычисляется по формуле

$$\Delta e = -\tau \frac{P + q}{\rho} \operatorname{div} \vec{u},$$

где q — искусственная вязкость. Соответственно полное приращение давления

$$\Delta P \approx -\tau \left(\rho c^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho \frac{q}{\rho} \right) \operatorname{div} \vec{u}.$$

Таким образом, приращение давления i -го компонента на счетном шаге, связанное с искусственной вязкостью, в методике ЭГАК будет равно

$$\Delta P_{qi} \approx -\tau \left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho \frac{q_i^n}{\rho_i^n} \xi_i^n \operatorname{div} \vec{u}. \quad (6)$$

Рассмотрим несколько способов (наиболее естественных с точки зрения авторов) определения искусственных вязкостей компонентов.

Способы определения искусственных вязкостей компонентов.

Способ 1. Наиболее простой способ — это задать для всех компонентов одинаковую искусственную вязкость, равную средней в ячейке. Тогда

$$q_i = \bar{q}; \quad \Delta e_i \sim \frac{\xi_i}{\rho_i}.$$

Таким образом, большая удельная энергия будет передаваться веществу с меньшей плотностью и большей дивергенцией скорости.

Приращение давления компонента на счетном шаге, связанное с искусственной вязкостью, определяется в данном случае выражением

$$\Delta P_{qi} \sim \left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho \frac{\xi_i}{\rho_i}. \quad (7)$$

Для многих УРСов $\left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho = \Gamma \rho_i$, где параметр $\Gamma = \gamma - 1$ для идеального газа, а для УРСа в форме Ми—Грюнайзена Γ — это коэффициент Грюнайзена. Тогда (7) можно представить в виде $\Delta P_{qi} \sim \Gamma_i \xi_i$. Отсюда следует, что при прохождении УВ приращение давлений компонентов на счетном шаге, связанное с искусственной вязкостью, будет больше у веществ с большим параметром Γ и большей дивергенцией скорости.

Способ 2. Этот способ заключается в использовании для компонентов искусственной вязкости в виде (2) со своими величинами ρ_i , h_i и $\text{div } \vec{u}_i$. В предположении $h_i = \beta_i h$ такой способ определения искусственной вязкости применялся в методе 1 [2]. С учетом условия нормировки (1) получим

$$q_i = q \frac{\rho_i \beta_i^2 \xi_i^2}{\sum_k \rho_k \beta_k^3 \xi_k^3}; \quad \Delta e_i \sim \beta_i^2 \xi_i^3; \quad \Delta P_{qi} \sim \left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho \beta_i^2 \xi_i^3, \quad \text{или} \quad \Delta P_{qi} \sim \Gamma_i \rho_i \beta_i^2 \xi_i^3.$$

Отсюда следует, что большая удельная энергия будет у веществ с большей объемной концентрацией и большей дивергенцией скорости и приращение давления будет пропорционально параметру Γ и плотности компонента.

Способ 3. Зададим искусственную вязкость для каждого компонента в предположении, что она пропорциональна плотности вещества. Такой способ задания искусственной вязкости использовался в работах [5, 7] в методах 2 и 3. Тогда

$$q_i = q \frac{\rho_i}{\sum_k \rho_k \beta_k \xi_k}; \quad \Delta e_i \sim \xi_i; \quad \Delta P_{qi} \sim \left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho \xi_i, \quad \text{или} \quad \Delta P_{qi} \sim \Gamma_i \rho_i \xi_i.$$

Большая удельная энергия будет у веществ с большей дивергенцией скорости, и приращение давления будет пропорционально параметру Γ и плотности компонента.

Способ 4. Предположим, что изменение удельной энергии за счет вязкости во всех веществах одинаково. Тогда из формул (1) и (3) следует, что

$$q_i = q \frac{\rho_i}{\bar{\rho} \xi_i}; \quad \Delta P_{qi} \sim \left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho, \quad \text{или} \quad \Delta P_{qi} \sim \Gamma_i \rho_i.$$

Способ 5. Предположим, что приращение давления на счетном шаге за счет вязкости во всех веществах одинаково. Из формул (1) и (6) следует, что

$$q_i = q \frac{\rho_i}{\xi_i \left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho \sum_k \frac{\beta_k \rho_k}{\left(\frac{\partial P_k}{\partial e_k} \right)_\rho}}; \quad \Delta e_i \sim \frac{1}{\left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho}, \quad \text{или} \quad \Delta e_i \sim \frac{1}{\Gamma_i \rho_i}.$$

То есть большее изменение удельной энергии будет в веществе с меньшей плотностью и с меньшим параметром Γ .

Способ 6. Данный способ основан на предположении, что приращение давления на счетном шаге за счет искусственной вязкости пропорционально приращению давления в адиабатическом приближении. Отсюда

$$B\rho_i c_i^2 = \left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho \frac{q_i}{\rho_i},$$

где B — коэффициент пропорциональности.

Используя также условие (1), получаем

$$q_i = q \frac{\rho_i^2 c_i^2}{\left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho \sum_k \frac{\beta_k \xi_k \rho_k^2 c_k^2}{\left(\frac{\partial P_k}{\partial e_k} \right)_\rho}}; \quad \Delta e_i \sim \frac{\xi_i \rho_i c_i^2}{\left(\frac{\partial P_i}{\partial e_i} \right)_\rho}, \quad \text{или} \quad \Delta e_i \sim \frac{\xi_i c_i^2}{\Gamma_i}; \quad \Delta P_{qi} \sim \xi_i \rho_i c_i^2.$$

Постановка и результаты тестовых расчетов

Проведены расчеты нескольких типов задач с использованием указанных выше трех методов замыкания уравнений газовой динамики для распределения дивергенции ячейки по компонентам и шести способов определения искусственных вязкостей компонентов. Эти задачи охватывают основные встречающиеся в практических расчетах случаи: прохождение УВ по смеси веществ, выход УВ из тяжелого вещества в легкое и выход УВ из легкого вещества в тяжелое. Во всех задачах используются безразмерные величины.

Прохождение УВ по смеси двух газов.

Задача 1. Постановка задачи взята из работы [1]. В области $0 < x < 100$ имеется смесь двух идеальных газов со следующими параметрами: вещество 0 — $\rho_0 = 1$, $e_0 = 0$, $\gamma_0 = 3$, $\beta_0 = 0,5$; вещество 1 — $\rho_1 = 1$, $e_1 = 0$, $\gamma_1 = 1,2$, $\beta_1 = 0,5$. На левой границе задана постоянная скорость $u = 2$.

По смеси газов движется УВ с массовой скоростью u . На фронте УВ при условии отсутствия адиабатического обмена энергиями между газами должно достигаться максимальное сжатие для каждого газа в отдельности, т. е. $\rho_0^{\text{УВ}} = 2$ для вещества 0 и $\rho_1^{\text{УВ}} = 11$ для вещества 1. Исходя из этих ожидаемых результатов, по известным для сильной УВ соотношениям можно получить средние плотность и давление за фронтом УВ, а также скорость ее распространения: $\bar{\rho} = 3,385$; $D = 2,836$; $\bar{P} = 5,672$ [7].

Расчеты проводились в лагранжевой постановке. Вся область разбивалась равномерно на 100 ячеек.

На рис. 1–3 представлены профили давлений компонентов, среднего давления и плотностей компонентов в зависимости от расстояния на момент времени $t = 25$ с использованием всех типов искусственной вязкости, определенных рассмотренными выше способами.

На рис. 1 представлены профили для метода 1: давлений (0-го компонента, 1-го компонента и среднего давления) и плотности компонентов (для данного метода в любой ячейке $\rho_0 = \rho_1 = \bar{\rho}$). На рис. 2 представлены профили среднего давления (для этого метода $P_0 \approx P_1 \approx \bar{P}$) и плотности компонентов для метода 2, на рис. 3 — профили давления (здесь также $P_0 \approx P_1 \approx \bar{P}$) и плотности компонентов для метода 3. Кроме того, на всех рисунках показано аналитическое решение.

Прохождение УВ из тяжелого вещества в легкое.

Задача 2.1. В области $0 < x < 19,95$ находится идеальный газ (вещество 0) с параметрами $\rho_0 = 0,00125$, $e_0 = 0$, $\gamma_0 = 2$. В области $19,95 < x < 60$ содержится вещество 1 с параметрами $\rho_1 = 7,82$, $e_1 = 0$ и УРСом в форме Ми–Грюнайзена

$$P = P_x(\rho) + \Gamma(E - E_x)\rho, \quad P_x = \frac{\rho_1^0 (c_1^0)^2}{n} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_1^0} \right)^n - 1 \right], \quad E_x = \int_{\rho_1^0}^{\rho} P_x(\rho) \frac{d\rho}{\rho^2}, \quad (8)$$

где $c_1^0 = 4,9$; $n = 3$; $\Gamma = 3,54777$; $\rho_1^0 = 7,82$.

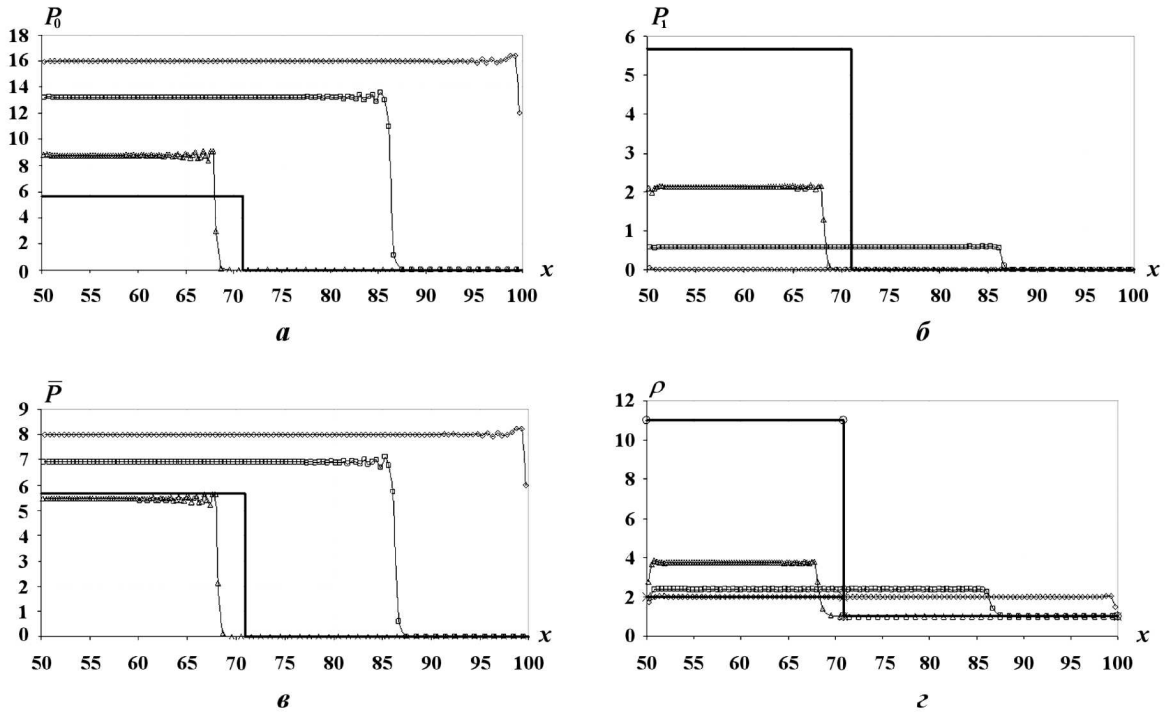


Рис. 1. Профили давлений компонентов 0 (а) и 1 (б), среднего давления (в) и плотности компонентов (з) в задаче 1, метод 1: \square — расчеты с искусственными вязкостями 1–4; \triangle — расчет с искусственной вязкостью 5; \diamond — расчет с искусственной вязкостью 6; — — аналитическое решение для давлений (а–в); \times — аналитическое решение для ρ_0 (з); \circ — аналитическое решение для ρ_1 (з)

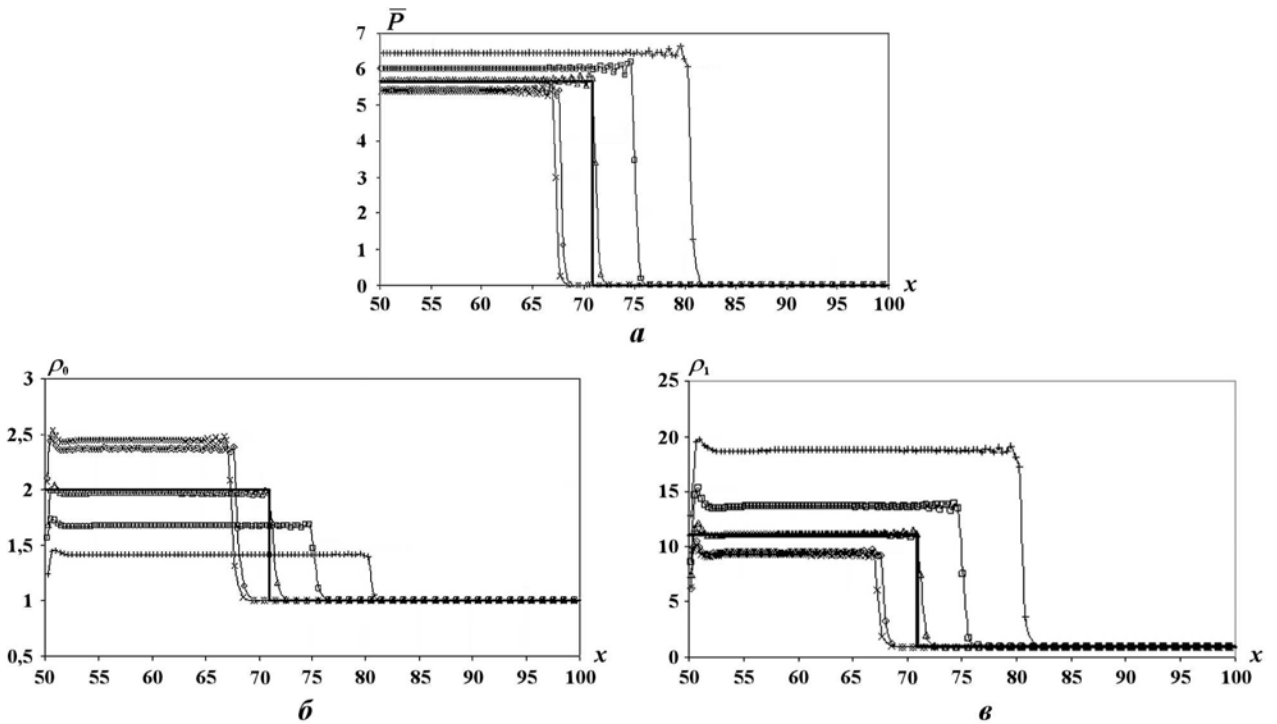


Рис. 2. Профили среднего давления (а) и плотностей компонентов 0 (б) и 1 (в) в задаче 1, метод 2: \square — расчет с искусственной вязкостью 1; \diamond — расчет с искусственной вязкостью 2; \triangle — расчет с искусственной вязкостью 3; \times — расчет с искусственной вязкостью 4; — — расчеты с искусственными вязкостями 5, 6; — — аналитическое решение

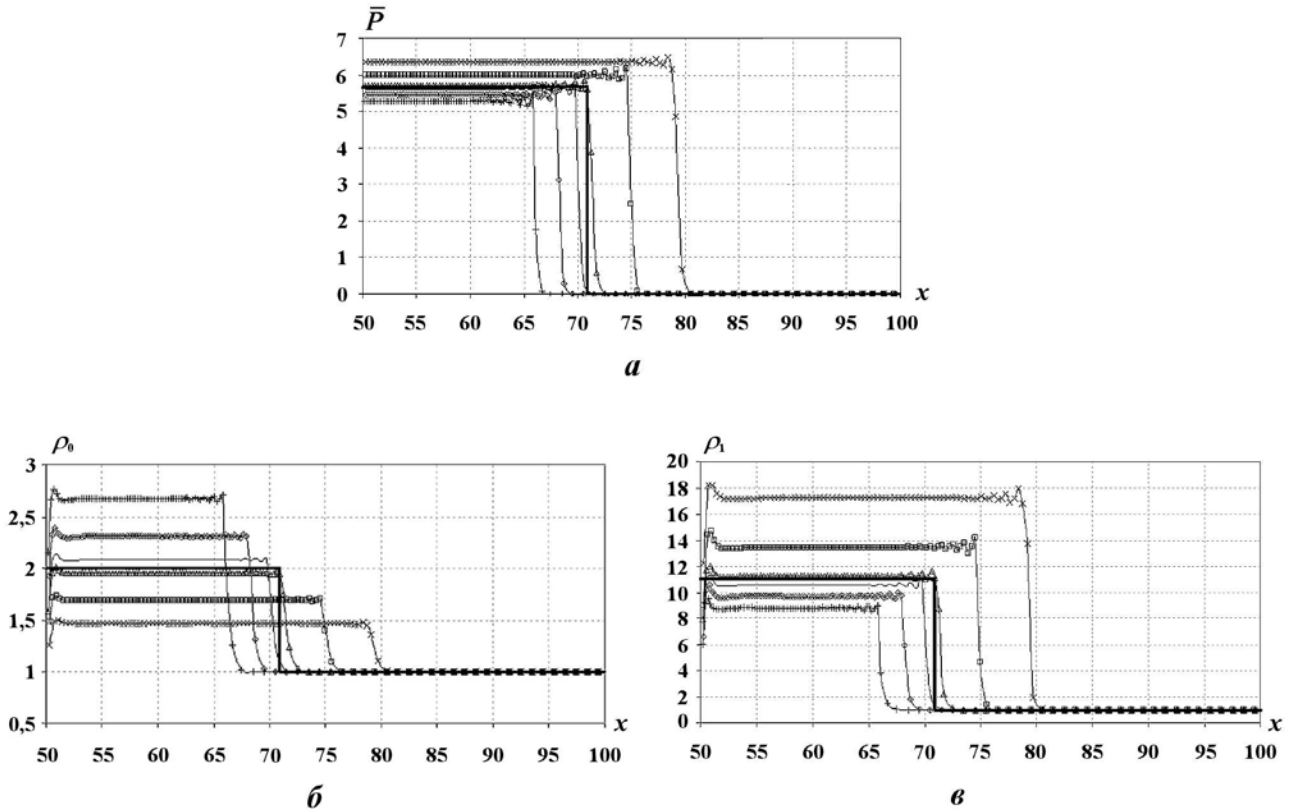


Рис. 3. Профили среднего давления (а) и плотностей компонентов 0 (б) и 1 (в) в задаче 1, метод 3: —□— — расчет с искусственной вязкостью 1; —◇— — расчет с искусственной вязкостью 2; —△— — расчет с искусственной вязкостью 3; —×— — расчет с искусственной вязкостью 4; —+— — расчет с искусственной вязкостью 5; — — — — расчет с искусственной вязкостью 6; — — — — аналитическое решение

Расчет проводился в эйлеровой постановке на неподвижной сетке. Область $0 < x < 20$ равномерно разбивалась на 200 интервалов, область $20 < x < 60$ — на 400 интервалов. В начальный момент времени контактная граница веществ находилась внутри ячейки с номером 200, где $\beta_0 = \beta_1 = 0,5$.

На правой границе $x = 60$ задавался втекающий поток вещества 1 с параметрами $\rho_1^{\text{rp}} = 8,571$, $e_1^{\text{rp}} = 0,112$, $u^{\text{rp}} = -0,473$, что аналогично заданию давления $P = 20$ на границе области при расчете в лагранжевых переменных (*лагранжев расчет*). На левой границе $x = 0$ — условие *жесткой стенки*.

Задача 2.2. Отличается от задачи 2.1 увеличенной в 100 раз плотностью вещества 0, т. е. $\rho_0 = 0,125$. Все остальные параметры задачи не меняются.

На рис. 4–6 представлены профили средней внутренней энергии, среднего давления и массовой скорости в зависимости от расстояния на момент времени $t = 12$, полученные при расчете задачи 2.1 с использованием методов 1–3, на рис. 7 — то же для задачи 2.2 с использованием метода 2. Также на всех рисунках приводятся результаты лагранжева расчета без смешанных ячеек и положение контактной границы веществ. Отметим, что результаты расчетов задачи 2.2 по методам 1 и 3 не приводятся, так как они ничего нового по сравнению с результатами задачи 2.1 не дали.

Прохождение УВ из легкого вещества в тяжелое.

Задача 3. В области $0 < x < 19,95$ находится идеальный газ (вещество 0) с параметрами $\rho_0 = 0,125$, $e_0 = 0$, $\gamma_0 = 2$. В области $19,95 < x < 60$ содержится вещество 1 с параметрами $\rho_1 = 7,82$, $e_1 = 0$ и УРСом в форме Ми–Грюнайзена (8) с параметрами $c_1^0 = 4,9$, $n = 3$, $\Gamma = 3,54777$, $\rho_1^0 = 7,82$.

Расчеты проводились на неподвижной сетке. Область $0 < x < 20$ равномерно разбивалась на 200 ячеек, область $20 < x < 60$ — на 400 ячеек. В начальный момент времени контактная граница веществ находилась внутри ячейки с номером 200, где $\beta_0 = \beta_1 = 0,5$.

На левой границе $x = 0$ задавался втекающий поток вещества с номером 0 и параметрами $\rho_0^{\text{rp}} = 0,375$, $e_0^{\text{rp}} = 2,666$, $u^{\text{rp}} = 2,309$, что аналогично заданию давления $P = 1$ на границе области в лагранжевом расчете. На правой границе $x = 60$ — условие жесткой стенки.

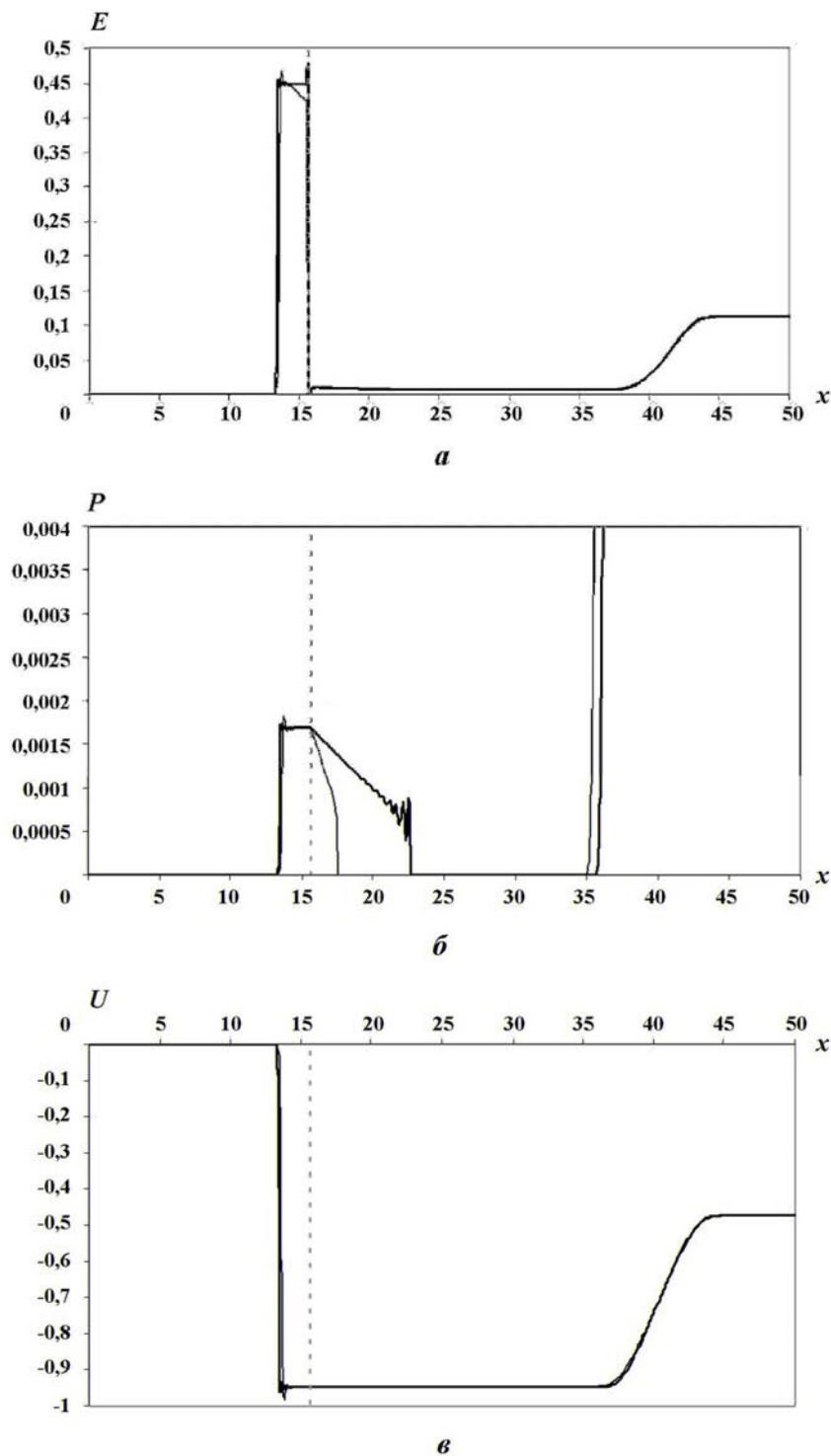


Рис. 4. Профили внутренней энергии (а), давления (б) и массовой скорости (в) в задаче 2.1, метод 1: — — расчеты с искусственными вязкостями 1–6; — — лагранжев расчет; - - - — контактная граница

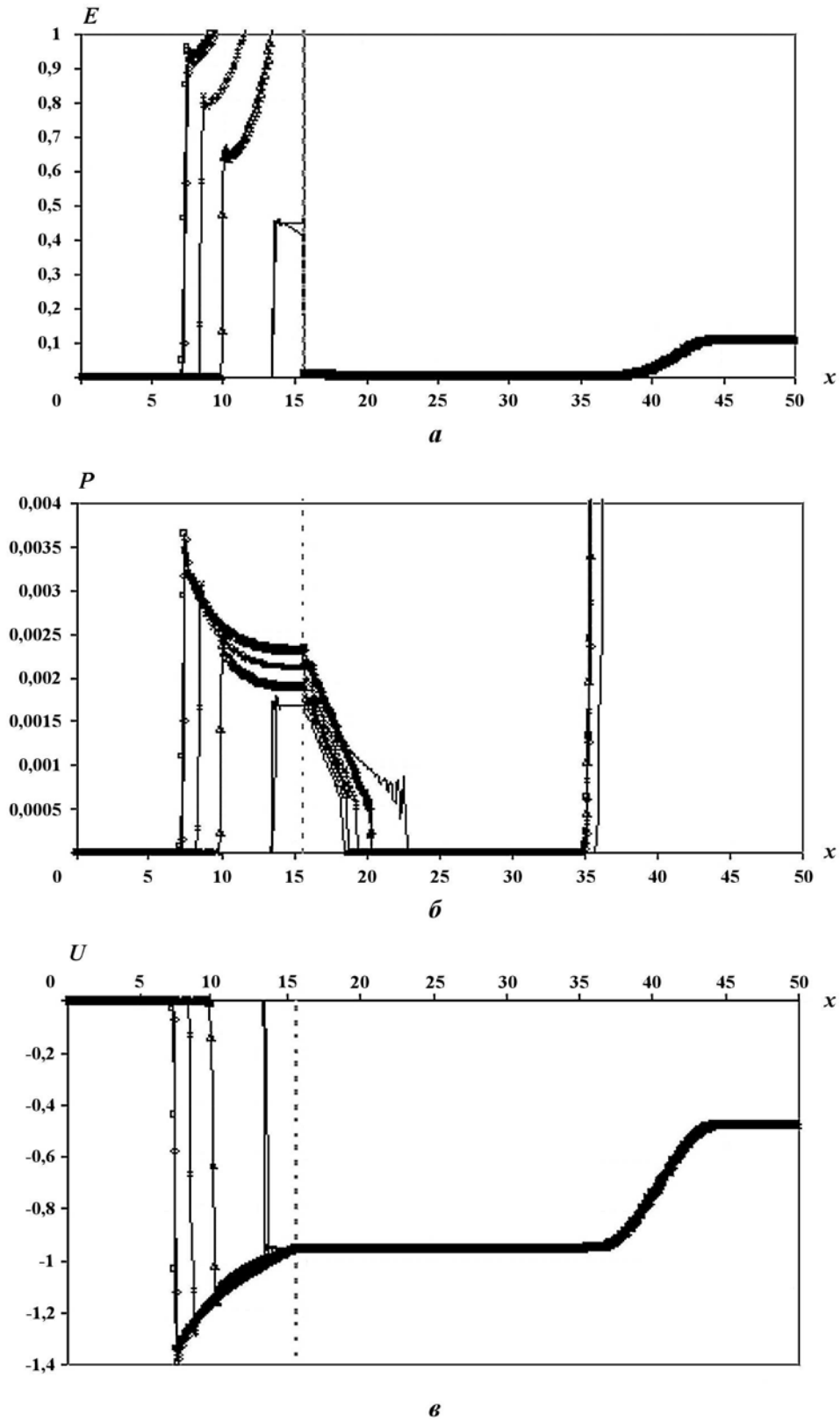


Рис. 5. Профили внутренней энергии (а), давления (б) и массовой скорости (в) в задаче 2.1, метод 2: —□— — расчет с искусственной вязкостью 1; —◇— — расчет с искусственной вязкостью 2; —△— — расчет с искусственной вязкостью 3; — — — — расчет с искусственной вязкостью 4; —×— — расчеты с искусственными вязкостями 5, 6; — — — — лагранжев расчет; - - - — контактная граница

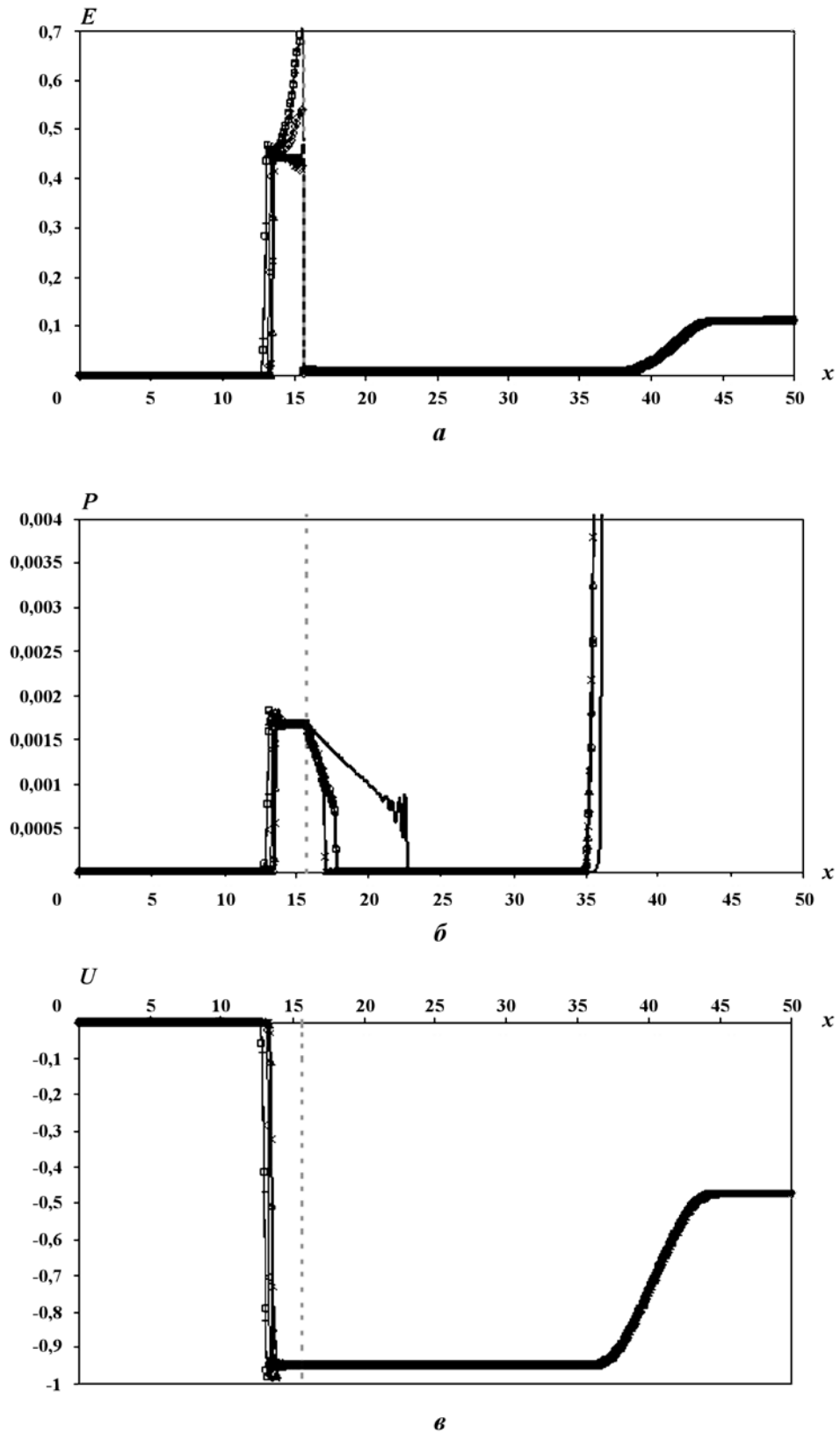


Рис. 6. Профили внутренней энергии (а), давления (б) и массовой скорости (в) в задаче 2.1, метод 3: —□— — расчет с искусственной вязкостью 1; —◇— — расчет с искусственной вязкостью 2; —△— — расчет с искусственной вязкостью 3; —×— — расчет с искусственной вязкостью 4; —+— — расчет с искусственной вязкостью 5; —*— — расчет с искусственной вязкостью 6; — — лагранжев расчет; - - - — контактная граница

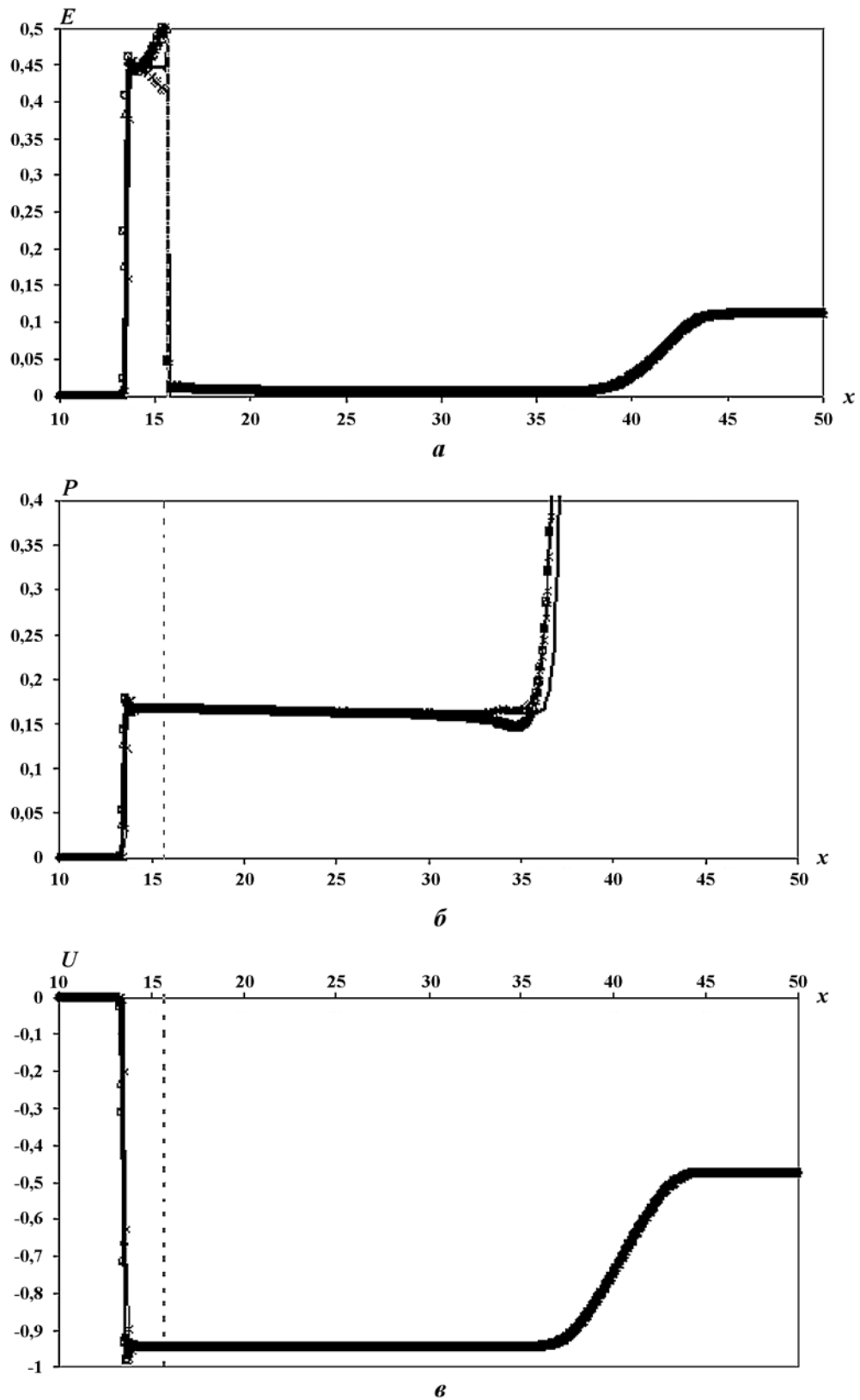
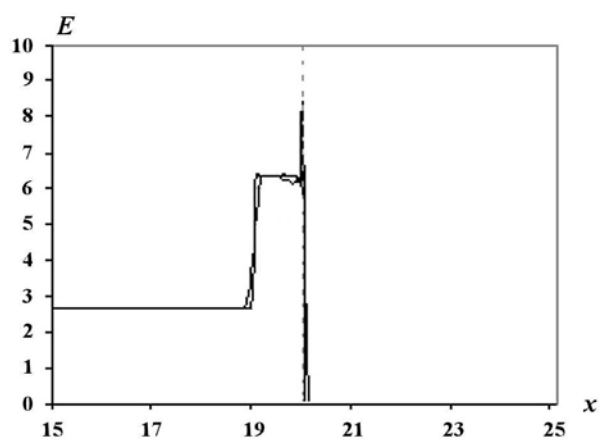
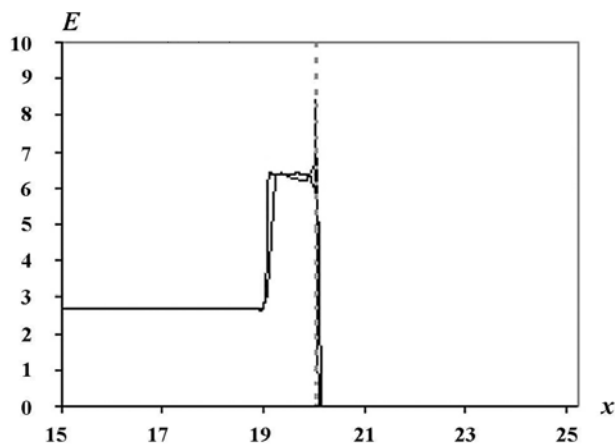


Рис. 7. Профили внутренней энергии (а), давления (б) и массовой скорости (в) в задаче 2.2, метод 2: —□— — расчет с искусственной вязкостью 1; —◇— — расчет с искусственной вязкостью 2; —△— — расчет с искусственной вязкостью 3; —×— — расчет с искусственной вязкостью 4; — — — — расчеты с искусственными вязкостями 5, 6; — — — — лагранжев расчет; - - - - контактная граница

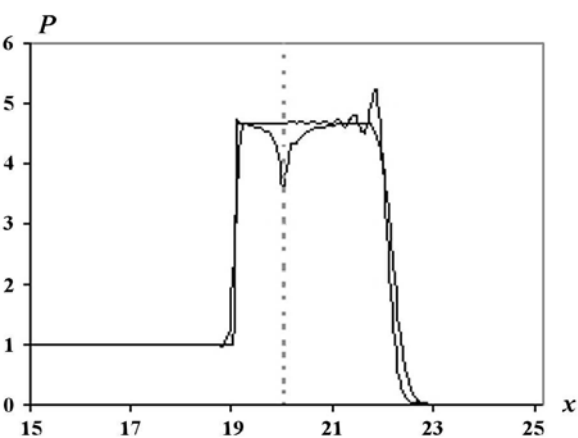
На рис. 8–10 представлены профили средней внутренней энергии, среднего давления и массовой скорости в зависимости от расстояния на момент времени $t = 6,2$. Также на всех рисунках приводятся результаты лагранжева расчета без смешанных ячеек и положение контактной границы веществ.



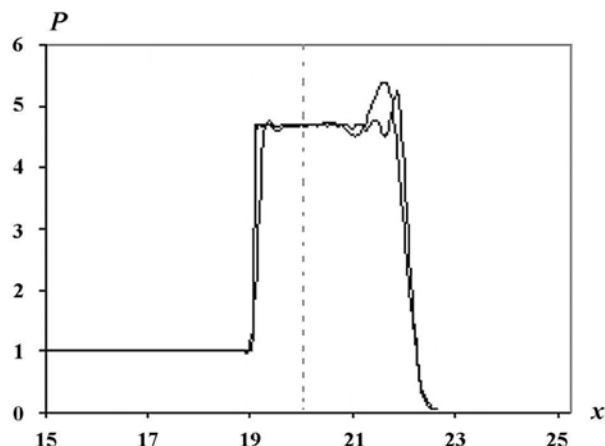
a



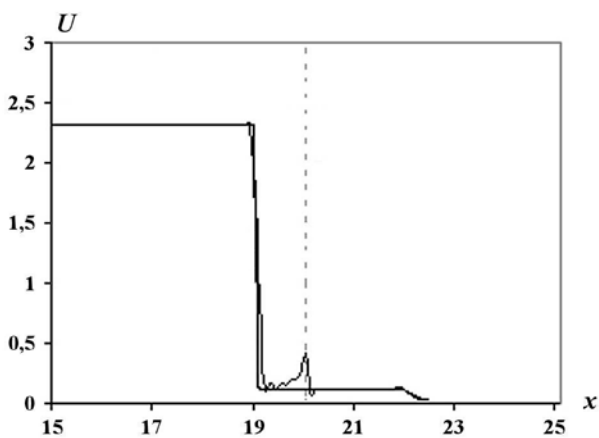
a



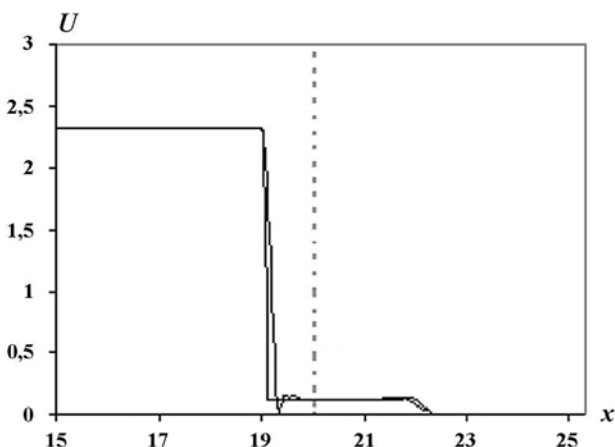
б



б



в



в

Рис. 8. Профили внутренней энергии (*a*), давления (*б*) и массовой скорости (*в*) в задаче 3, метод 1: — — расчеты с искусственными вязкостями 1–6; — — лагранжев расчет; - - - — контактная граница

Рис. 9. Профили внутренней энергии (*a*), давления (*б*) и массовой скорости (*в*) в задаче 3, метод 2: — — расчеты с искусственными вязкостями 1–6; — — лагранжев расчет; - - - — контактная граница

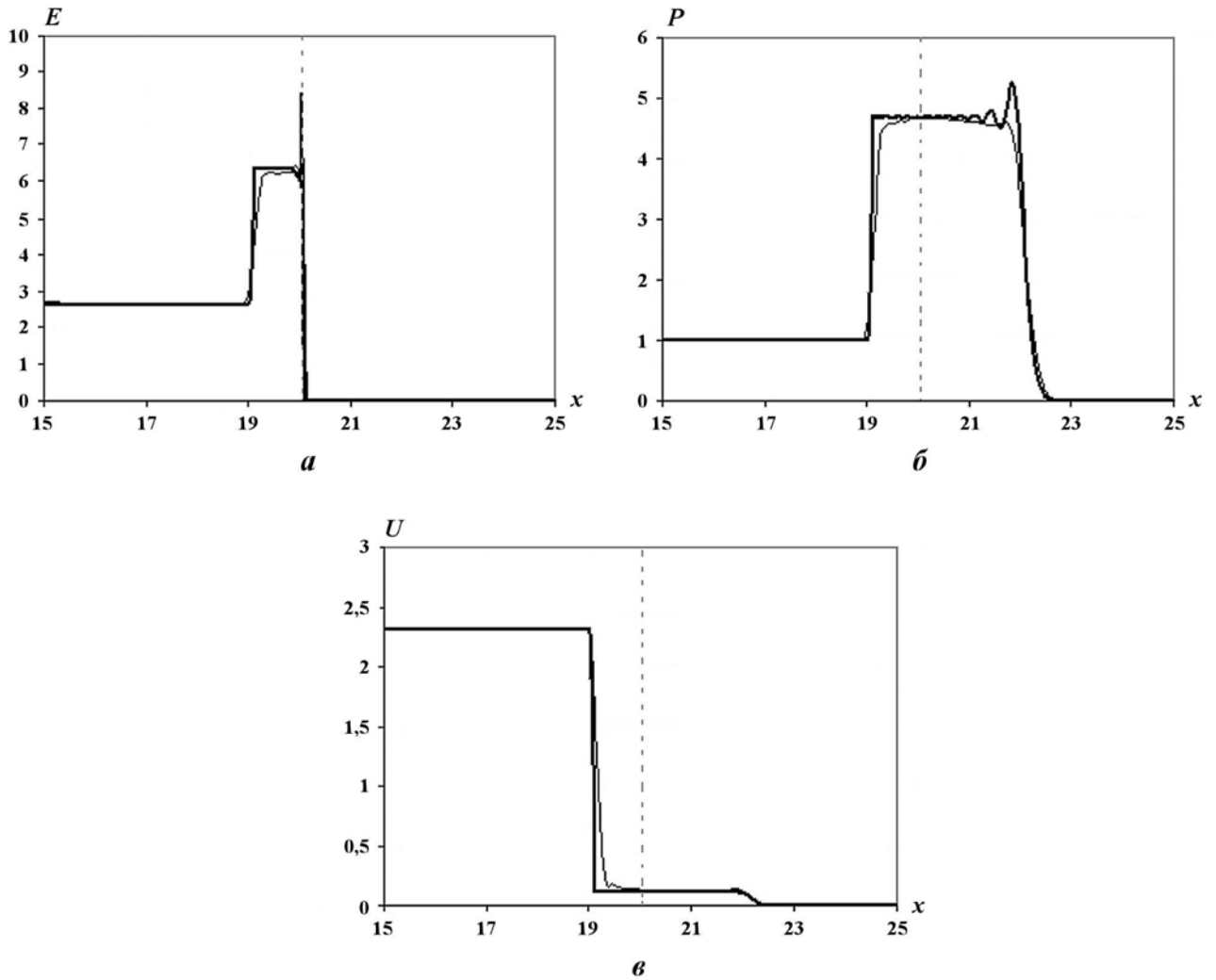


Рис. 10. Профили внутренней энергии (а), давления (б) и массовой скорости (в) в задаче 3, метод 3: — — расчеты с искусственными вязкостями 1–6; — — лагранжев расчет; - - - — контактная граница

Обсуждение результатов расчетов

В таблице приводятся оценки расчетов вышеуказанных задач. Оценки даются следующим образом: за хороший по точности результат ставится отметка +, за неудовлетворительный результат ставится знак –, за более или менее приемлемый результат +–. Конечно, все эти оценки довольно условны и субъективны, так как не имеют строгого математического обоснования. Корректность выставленных оценок можно проверить по результатам проведенных расчетов, представленных на вышеприведенных рисунках.

Задача 1. Результаты расчетов по методу 1 неудовлетворительны по точности описания как давлений и плотностей компонентов, так и среднего давления при всех видах вязкости. Лишь для вязкости 5 можно отметить приемлемое согласие с аналитическим решением для среднего давления, однако давления и плотности компонентов существенно отличаются от аналитического решения. Методы 2 и 3 дают значительно лучшие результаты, однако лишь при определенных видах вязкости. Лучший результат для метода 2 получен при вязкости 3, более или менее приемлемый результат – при вязкости 6. Метод 3 показал лучший результат также при вязкости 3 и вполне точный результат – при вязкости 6.

Оценка результатов тестовых расчетов

Метод распределения дивергенции	Номер задачи	Способы определения					
		q_i					
		1	2	3	4	5	6
1	1	–	–	–	–	–	–
	2.1	+	+	+	+	+	+
	2.2	+	+	+	+	+	+
	3	–	–	–	–	–	–
2	1	–	–	+	–	–	+-
	2.1	–	–	–	+	–	–
	2.2	+	+	+	+	+	+
	3	+-	+-	+-	+-	+-	+-
3	1	–	–	+	–	–	+-
	2.1	+	+	+	+	+-	+
	2.2	+	+	+	+	+	+
	3	+	+	+	+	+	+

Задача 2.1. Результаты расчетов по методу 1 хорошо согласуются с результатом расчета в лагранжевых переменных для всех видов вязкости. Для метода 2 лишь при вязкости 4 можно отметить хорошее согласие с лагранжевым расчетом, остальные вязкости дают неприемлемые результаты. Метод 3 продемонстрировал хорошее согласие с лагранжевым расчетом для всех видов вязкости, кроме вязкости 5, однако и для этой вязкости согласие вполне приемлемо.

Задача 2.2. Результаты расчетов по всем трем методам с использованием всех вязкостей удовлетворительно согласуются с результатом расчета в лагранжевых переменных.

Задача 3. Результаты расчетов по методу 1 с использованием всех вязкостей неудовлетворительны с точки зрения описания профилей давления и массовой скорости. Приемлемые результаты для этой задачи получены по методам 2 и 3 со всеми видами вязкости для компонентов.

Заключение

Проведено численное исследование ударно-волновых течений в лагранжево-эйлеровых переменных для трех методов замыкания уравнений газодинамики в смешанных ячейках с вариацией шести способов определения искусственных квадратичных вязкостей для веществ. Исследованы следующие методы замыкания:

- метод 1, основанный на равенстве дивергенций скоростей компонентов;
- метод 2, основанный на равенстве приращений давлений компонентов;
- метод 3, основанный на равенстве массовых скоростей компонентов после прохождения малого возмущения.

Проведенное исследование тестовых задач в разных постановках позволяет однозначно ответить на вопрос о точности рассмотренных методов при моделировании ударно-волновых течений. Наиболее универсальным является метод 3 с определением квадратичных искусственных вязкостей компонентов по третьему способу (искусственная вязкость пропорциональна плотности компонента). Во всех рассмотренных в данной статье тестовых расчетах при использовании этого метода получены удовлетворительные результаты. Отметим, что и в других тестовых расчетах в работах [7, 8] при использовании метода 3 наблюдалось хорошее согласие расчетных и аналитических результатов.

Для отдельных задач удается добиться хороших результатов и при использовании методов 1 и 2. Метод 1 дает хорошие результаты при счете газодинамических течений при выходе УВ из тяжелого вещества в легкое. При этом результаты расчетов практически не зависят от способа определения

искусственной вязкости в компонентах. Метод 2 показывает хорошие результаты в расчетах для областей с гетерогенной смесью веществ. При этом квадратичную искусственную вязкость для компонентов следует задавать по третьему способу.

Таким образом, показано, что в смешанных ячейках, кроме выбора метода распределения дивергенции скорости по компонентам, следует обращать особое внимание и на способ определения искусственной вязкости для веществ, так как это может оказывать существенное влияние на точность расчетов.

Авторы выражают благодарность В. Ф. Спиридонову за полезные обсуждения затронутых в данной работе вопросов, а также за формулировку тестовой задачи 2.1.

Список литературы

1. *Бондаренко Ю. А., Янилкин Ю. В.* Расчет термодинамических параметров смешанных ячеек в газовой динамике // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 4. С. 12–25.
2. *Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А.* Метод расчета двумерных осесимметричных газодинамических течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых переменных // Докл. АН СССР. 1984. Т. 278, № 4. С. 829–833.
3. *Харлоу Ф. Х.* Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967.
4. *Жарова Г. В., Янилкин Ю. В.* Комплекс программ ЭГАК. Алгоритм выравнивания давлений веществ в смешанных ячейках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 3. С. 77–82.
5. *Гончаров Е. А., Янилкин Ю. В.* Новый метод расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках // Там же. 2004. Вып. 3. С. 16–30.
6. *Делов В. И., Садчиков В. В.* Сравнение некоторых моделей для расчета термодинамических параметров неоднородных по составу лагранжевых ячеек // Там же. 2005. Вып. 1. С. 57–70.
7. *Гончаров Е. А., Колобянин В. Ю., Янилкин Ю. В.* Метод замыкания уравнений лагранжевой газодинамики в смешанных ячейках, основанный на равенстве скоростей компонентов // Там же. 2006. Вып. 4. С. 100–105.
8. *Гончаров Е. А., Колобянин В. Ю., Садчиков В. В., Янилкин Ю. В.* Сравнение различных методов расчета термодинамического состояния смешанных ячеек в лагранжевой газодинамике // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2009. Т. 14. С. 54–71.
9. *Дарова Н. С., Дибиров О. А., Жарова Г. В., Шанин А. А., Янилкин Ю. В.* Комплекс программ ЭГАК. Лагранжево-эйлерова методика расчета двумерных газодинамических течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 2. С. 51–58.

Статья поступила в редакцию 31.10.08.

УДК 517.958:536.2

ПРИМЕНЕНИЕ TVD-ПОДХОДА К DS_n -МЕТОДУ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ RZ -ГЕОМЕТРИИ

А. Д. Гаджиев, В. В. Завьялов, А. А. Шестаков

(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Рассматривается реализация неявной нелинейной схемы типа TVD повышенного порядка аппроксимации для решения уравнения переноса теплового излучения в осесимметричной RZ -геометрии. Ранее данная схема была апробирована в плоском и сферически-симметричном случаях. Приводятся результаты численных расчетов тестовых задач.

Ключевые слова: перенос излучения, разностная схема, метод дискретных ординат, TVD-подход.

Введение

Для численного моделирования задач переноса теплового излучения разработка монотонных схем второго порядка аппроксимации является актуальной проблемой. Широко используемый для решения уравнения переноса метод дискретных ординат (DS_n -метод) [1] приводит к решению системы гиперболических уравнений. В то же время известно, что для гиперболических уравнений в классе линейных схем нет монотонной схемы с порядком аппроксимации выше первого. На практике, чтобы совместить в определенной степени монотонность и второй порядок аппроксимации, используются различные монотонизаторы [1]. В разработанной в РФЯЦ-ВНИИТФ DDAD-схеме [2] вводится искусственная диссипация. Хотя построенную подобным образом схему нельзя считать монотонной, она оказалась весьма эффективной для моделирования широкого класса задач.

Одним из путей решения рассматриваемой проблемы является переход к нелинейным TVD-схемам (Total Variation Diminishing) (см., например, [3]). В работе [4] в рамках DS_n -метода построена неявная нелинейная схема типа TVD для нестационарного одномерного уравнения переноса теплового излучения, которая демонстрирует монотонность, а по точности близка ко второму порядку. Построенная указанным способом схема типа TVD обладает следующими свойствами:

1. Неявность, безусловная устойчивость.
2. Монотонность в смысле принадлежности к классу TVD-схем.
3. Первый порядок аппроксимации по времени и второй порядок аппроксимации по пространству, кроме отдельных точек с экстремумами.
4. Консервативность в смысле выполнения разностного аналога интегрального закона сохранения в каждой ячейке.
5. Аппроксимация, как и в DS_n -методе, в рамках одной ячейки, если говорить о величинах с верхнего временного слоя. Данное свойство позволяет применять экономичный метод бегущего счета для решения системы разностных уравнений.

В данной работе схема из [4] обобщена на случай двумерной цилиндрически-симметричной геометрии с сохранением вышеперечисленных достоинств. Дополнительно в Приложении рассматривается вопрос о порядке аппроксимации схемы.

Постановка задачи

Система уравнений, описывающая распространение излучения, состоит из спектрального уравнения переноса в кинетической постановке, описывающего перенос, поглощение и рассеяние теплового излучения, и уравнения энергии, характеризующего изменение температуры вещества за счет поглощения и испускания фотонов. Данная система в осесимметричном спектральном случае для изотропного рассеяния выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{c} \frac{d}{dt} \left(\frac{I_\nu}{\rho} \right) + \vec{\Omega} \nabla I_\nu + \alpha_\nu I_\nu &= \kappa_\nu B_\nu + \frac{k_\nu}{2\pi} U_\nu; \\ \rho \frac{\partial E}{\partial t} &= \int_0^\infty \int_{\vec{\Omega}} \kappa_\nu (I_\nu - B_\nu) d\vec{\Omega} d\nu. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\rho(\vec{r}, t)$ — плотность вещества; $\vec{r} = (r, z)$ — радиус-вектор; t — время; $I_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}, \nu, t)$ — спектральная интенсивность излучения; ν — энергия фотонов; $\vec{\Omega} = (\mu = \cos \theta, \xi = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi, \eta = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi)$ — единичный вектор в направлении полета фотона; θ — угол между $\vec{\Omega}$ и осью Z ; ϕ — угол между \vec{r} и проекцией $\vec{\Omega}$ на плоскость, перпендикулярную оси R ; $\vec{\Omega} \nabla I_\nu = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \xi I_\nu) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} (r \mu I_\nu) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} (\eta I_\nu)$ — оператор переноса; $B_\nu(T, \nu)$ — интенсивность равновесного излучения (функция Планка); $T(\vec{r}, t)$ — температура среды; $U_\nu = \int_{\vec{\Omega}} I_\nu d\vec{\Omega}$ — спектральная плотность энергии излучения, умноженная на скорость света c ; $\kappa_\nu(T, \nu)$ — коэффициент поглощения; $k_\nu(T, \nu)$ — коэффициент рассеяния; $\alpha_\nu(T, \nu) = \kappa_\nu + k_\nu$ — коэффициент ослабления; $E(T)$ — удельная внутренняя энергия вещества.

Для системы уравнений переноса (1) в некоторой области G , ограниченной замкнутой поверхностью \bar{G} , решается краевая задача со следующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} I_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}, \nu, t = 0) &= I_\nu^0(\vec{r}, \vec{\Omega}, \nu); \\ I_\nu(\vec{r} \in \bar{G}, \vec{\Omega} \vec{n} < 0, \nu, t) &= I_\nu(\vec{r} \in \bar{G}, \vec{\Omega}, \nu, t); \\ T(\vec{r}, t = 0) &= T^0(\vec{r}), \end{aligned} \quad (2)$$

где \vec{n} — внешняя нормаль к \bar{G} . В силу осевой симметрии справедливо условие

$$I_\nu(r = 0, z, \mu, \phi, \nu, t) = I_\nu(r = 0, z, \mu, 2\pi - \phi, \nu, t), \quad \vec{\Omega} \vec{n} = \xi, \quad (3)$$

поэтому рассматривается только область значений $-1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \phi \leq \pi$.

Разностная аппроксимация

При разностной аппроксимации используется левая система координат. В качестве оси абсцисс используется ось Z , в качестве оси ординат — ось R . Для системы уравнений переноса (1) решается краевая задача с соответствующими начальными и граничными условиями (2), (3) в области

$$(t^0, t^{\hat{n}}) \times (-\infty < z < \infty, r \geq 0) \times (-1 \leq \mu \leq 1, 0 \leq \phi \leq \pi).$$

Для получения конечно-разностной схемы интегрирование уравнений производится по ячейке $G_{i+1/2,j+1/2}$ сетки ($i = 0, \dots, \hat{i} - 1, j = 0, \dots, \hat{j} - 1$) (рис. 1). Как правило, дробные индексы будем опускать. Объем и площадь ячейки равны

$$\begin{aligned} \Delta V &= \frac{1}{6} (r_1 + r_2 + r_3) \left[r_1 (z_3 - z_2) + r_2 (z_1 - z_3) + r_3 (z_2 - z_1) \right] + \\ &\quad + \frac{1}{6} (r_1 + r_3 + r_4) \left[r_1 (z_4 - z_3) + r_3 (z_1 - z_4) + r_4 (z_3 - z_1) \right]; \\ \Delta S &= 0,5 [(r_1 - r_3) (z_2 - z_4) + (r_2 - r_4) (z_3 - z_1)]. \end{aligned}$$

Введем следующие разности: $\Delta f_{i \rightleftharpoons j} = f_{i,j+1 \rightleftharpoons i+1,j} - f_{ij}$; $\Delta_* f = f_{*+1} - f_*$ ($*$ — некоторый индекс) и зададим векторы нормалей к ребрам ячеек разностной сетки, направленные в сторону возрастания индексов:

$$\begin{aligned} \vec{n}_i &= \left(\frac{\Delta z_i}{\sqrt{\Delta r_i^2 + \Delta z_i^2}}, -\frac{\Delta r_i}{\sqrt{\Delta r_i^2 + \Delta z_i^2}} \right); \quad \vec{n}_j = \left(-\frac{\Delta z_j}{\sqrt{\Delta r_j^2 + \Delta z_j^2}}, \frac{\Delta r_j}{\sqrt{\Delta r_j^2 + \Delta z_j^2}} \right); \\ \Delta s_i &= \sqrt{\Delta r_i^2 + \Delta z_i^2}; \quad \Delta s_j = \sqrt{\Delta r_j^2 + \Delta z_j^2}; \quad \vec{\varphi}_i = \vec{n}_i \Delta s_i; \quad \vec{\varphi}_j = \vec{n}_j \Delta s_j. \end{aligned}$$

Производя интегрирование (1) в пространстве $(t^n, t^{n+1}) \times G_{i+1/2,j+1/2} \times (\phi_{l+1}, \phi_l) \times (\mu_{m+1}, \mu_m)$ и используя формулу Гаусса—Остроградского, получим

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{n+1}}{c\tau} \left[\left(\frac{I_g}{\rho} \right)^{n+1} - \left(\frac{I_g}{\rho} \right)^n \right] + \vec{\Omega} \nabla_h I_g^{n+1} + \alpha_g^{n+1} I_g^{n+1} &= Q_g^{n+1}; \\ \rho^{n+1} \frac{E^{n+1} - E^n}{\tau} &= \sum_g w_g \kappa_g^{n+1} (U_g^{n+1} - 2\pi B_g^{n+1}), \end{aligned} \quad (4)$$

где $\tau = t^{n+1} - t^n$; $Q_g^{n+1} = \kappa_g^{n+1} B_g^{n+1} + \frac{k}{2\pi} U_g^{n+1}$; w_g — весовой коэффициент. Оператор переноса в разностном виде:

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \nabla_h I_g &= \frac{\Delta_i (\varpi I_g) + \Delta_j (\varpi I_g)}{\Delta V} - \frac{\Delta S}{\Delta V} \frac{\Delta_l (\eta I_g)}{\Delta_l \phi}, \\ \varpi_i &= \left(\vec{\Omega} \vec{n} \Delta s r \right)_i = \xi \Delta z_i - \mu \Delta r_i = \xi (z_{i,j+1} - z_{ij}) - \mu (r_{i,j+1} - r_{ij}), \\ \varpi_j &= \left(\vec{\Omega} \vec{n} \Delta s r \right)_j = -\xi \Delta z_j + \mu \Delta r_j = -\xi (z_{i+1,j} - z_{ij}) + \mu (r_{i+1,j} - r_{ij}). \end{aligned}$$

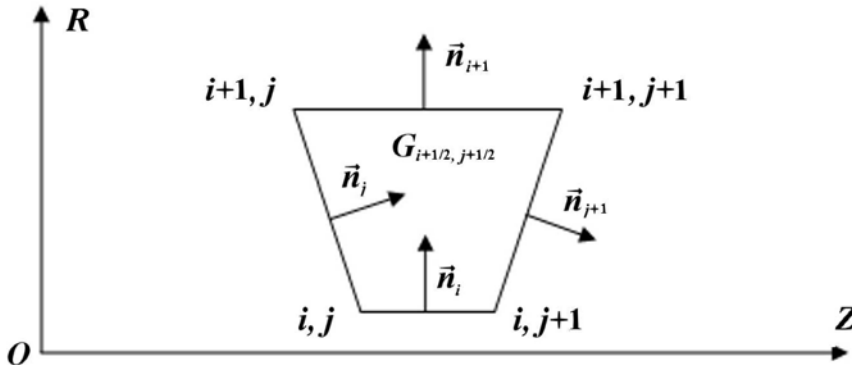


Рис. 1. Ячейка пространственной разностной сетки

Тогда уравнение переноса (4) можно записать в виде

$$\varpi_{i+1} I_{i+1,g}^{n+1} - \varpi_i I_{ig}^{n+1} + \varpi_{j+1} I_{j+1,g}^{n+1} - \varpi_j I_{jg}^{n+1} - \Delta S \frac{\eta_{l+1} I_{l+1,g}^{n+1} - \eta_l I_{lg}^{n+1}}{\Delta_l \phi} + \hat{a}_g^{n+1} I_g^{n+1} = \hat{Q}_g^{n+1}, \quad (5)$$

где $\hat{a}_g^{n+1} = \left(\frac{\rho^{n+1}}{c\tau} + a_g^{n+1} \right) \Delta V$; $\hat{Q}_g^{n+1} = \left[\frac{\rho^{n+1}}{c\tau} \left(\frac{I_g}{\rho} \right)^n + Q_g^{n+1} \right] \Delta V$.

Систему (4) нужно дополнить краевыми условиями и соотношениями связи значений I_g в центрах и на гранях ячеек. Для выпуклой ячейки при фиксированном $\vec{\Omega}$ существуют конфигурации трех типов (рис. 2).

Для широко используемой WDD-схемы соотношения связи задаются следующим образом:

$$I^+ = (1 + p) I - p I^-,$$

где I — интенсивность в центре ячейки; I^+ , I^- — значения на неосвещенных и освещенных гранях соответственно; $p \in [0, 1]$ — вес. Шаговая St-схема ($p = 0$) имеет первый порядок точности, алмазная DD-схема ($p = 1$) имеет второй порядок точности, но она немонотонна и неположительна. На произвольных четырехугольных сетках возникают ячейки с одной освещенной и тремя неосвещенными сторонами, для которых приходится применять соотношения St-схемы, имеющие первый порядок точности. Кроме того, на St-схему делается переход в тех ячейках, где DD-схема дает отрицательное решение. Тем не менее данная DD/St-коррекция также неудовлетворительна, поскольку осцилляции в положительной области решения остаются.

Для повышения порядка аппроксимации обобщим нелинейную TVD-подобную схему, рассмотренную в [4], на двумерную систему (4). С этой целью в соответствии с TVD-методологией в качестве производных по всем направлениям берутся некоторые ограничители L , которые обычно используют односторонние производные. Добавление производных эквивалентно введению антидиффузии в St-схему таким образом, чтобы новая схема имела второй порядок аппроксимации и сохраняла при этом монотонность.

Пусть $L(I)$ — некоторая функция-ограничитель, тогда можно записать следующие соотношения:

$$L_*^n = L(\Delta_{*+1/2} I^n, \Delta_{*-1/2} I^n); \quad (D_*^\pm)^n = 1 \pm \frac{L_*^n}{2I_*^n}; \quad I_{* \pm 1/2}^{n+1} = D_*^\pm I_*^{n+1}.$$

Поскольку D^\pm является дробно-линейным функционалом, можно брать его с n -го шага в предположении слабого изменения на итерациях. В этом случае можно использовать экономичный алгоритм бегущего счета.

Подставляя вышеприведенные соотношения связи в уравнение (5), получаем формулу для определения интенсивности в центре ячейки:

$$I^{n+1} = \frac{C_i^{n+1} + C_j^{n+1} + C_l^{n+1} + \hat{Q}^{n+1}}{\Phi_i^n + \Phi_j^n + \Phi_l^n + \hat{a}^{n+1}},$$

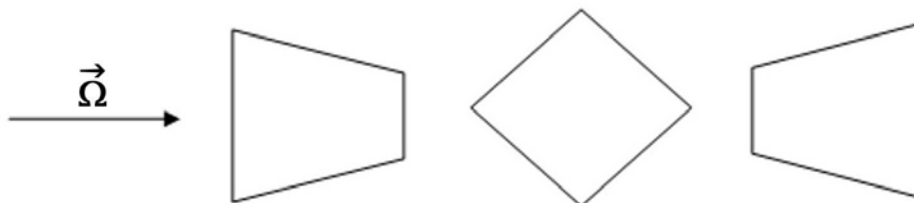


Рис. 2. Варианты освещенности ячеек

где

$$C_i = -\varpi_{i+1}I_{i+1}; \quad \Phi_i = -\varpi_i D_{i+1/2}^- \quad \text{при } \varpi_i \leq 0; \quad \varpi_{i+1} < 0;$$

$$C_i = 0; \quad \Phi_i = \varpi_{i+1}D_{i+1/2}^+ - \varpi_i D_{i+1/2}^- \quad \text{при } \varpi_i \leq 0; \quad \varpi_{i+1} \geq 0;$$

$$C_i = \varpi_i I_i; \quad \Phi_i = \varpi_{i+1}D_{i+1/2}^+ \quad \text{при } \varpi_i > 0; \quad \varpi_{i+1} \geq 0;$$

$$C_i = \varpi_i I_i - \varpi_{i+1}I_{i+1}; \quad \Phi_i = 0 \quad \text{при } \varpi_i > 0; \quad \varpi_{i+1} < 0;$$

$$C_l = -\Delta S \frac{\eta_l I_l}{\Delta_l \phi}; \quad \Phi_l = -\Delta S \frac{\eta_{l+1} D_{l+1/2}^+}{\Delta_l \phi};$$

C_j, Φ_j вычисляются аналогично C_i, Φ_i .

Для вычисления разностей, используемых в ограничителе, можно использовать более точное выражение для оператора $\nabla_h I$ на гранях разностной ячейки через расширение шаблона конечно-

разностной схемы с привлечением значений интенсивности в окружающих ячейках (рис. 3). Положим градиент на ребре $\beta_1\beta_2$ равным полусумме градиентов в узлах β_1, β_2 . Тогда разность интенсивностей в центре и на грани можно представить в виде

$$I - I_{\beta_1\beta_2} = (\nabla_h I)_{\beta_1\beta_2} (\vec{r}_{\beta_3\beta_4} - \vec{r}_{\beta_1\beta_2});$$

$$(\nabla_h I)_{\beta_2} = \frac{4}{\sum_{\gamma} \Delta S_{\alpha\gamma}} \sum_{\gamma} (\vec{n} \Delta s)_{\beta_2} (\Delta_{\alpha\gamma} I),$$

$$\alpha_5 = \alpha_1.$$

Хотя аппроксимация разностей на расширенном шаблоне может быть более точной, она требует дополнительных вычислительных затрат.

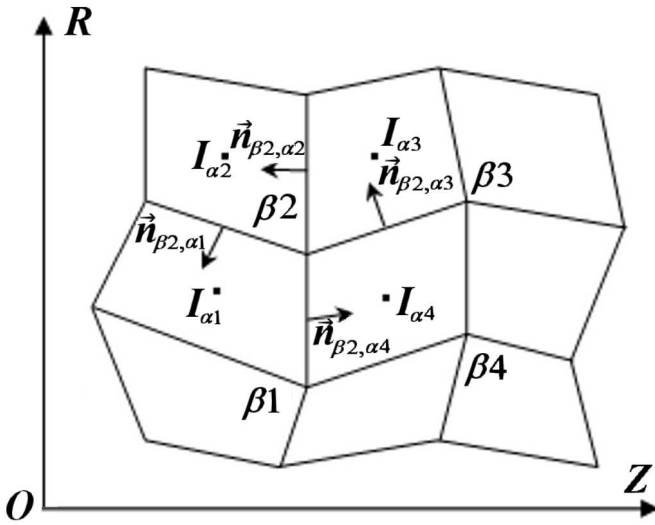


Рис. 3. Аппроксимация $\nabla_h I$ на расширенном шаблоне

Численные результаты

Рассмотрим две задачи в нерассеивающей среде ($k_g = 0$): вторую задачу Флека и тест с аналитическим решением. В схеме TVD использовался ограничитель Чакравати—Ошера [5]

$$L(a, b) = 0,5(1 - \delta) \min \text{mod}(a, \beta b) + 0,5(1 + \delta) \min \text{mod}(\beta a, b),$$

$$\min \text{mod}(a, b) = 0,5(\text{sign}(a) + \text{sign}(b)) \min(|a|, |b|)$$

с параметрами $\delta = 1/3, \beta = 3$. Сходимость определялась условием $|T^{\nu+1} - T^{\nu}| \leq 10^{-5} (1 + T^{\nu+1})$; $T^0 = 0,01$. Временной шаг выбирался так, что $c\tau = 0,03$; использовалась квадратура ES_{12} .

Задача 1. Рассматривается вторая задача Флека в сферически-симметричной геометрии [6]. На левой границе задано излучение планковского источника температуры $B_{\nu}(T = 1)$, на правой — условие *свободной поверхности*. В областях 1, 3 ($1 \leq r \leq 3; 3,4 \leq r \leq 5$) коэффициент поглощения равен $\kappa_{\nu} = 27(1 - e^{-\nu/T})/\nu^3$, в области 2 ($3 \leq r \leq 3,4$) $\kappa_{\nu} = 10000(1 - e^{-\nu/T})/\nu^3$, и всюду $E = 0,81T$.

Сетка по радиусу: $r_1 = 1; 1,004; 1,04; r_4 = 1,1; \dots; r_{22} = 2,9 (\Delta r = 0,1); r_{23} = 2,987; 2,999; 3; 3,001; 3,004; 3,013; r_{29} = 3,04; \dots; r_{37} = 3,36 (\Delta r = 0,04); r_{38} = 3,396; 3,4; 3,404; 3,44; r_{42} = 3,5; \dots; r_{57} = 5 (\Delta r = 0,1)$. В двумерной геометрии во втором направлении взято 59 каналов. Сетка по энергии: $\nu_{0.. \hat{g}=15} = 0; 0,3; 0,6; 0,8; 1,2; 1,5; 1,8; 2,4; 2,7; 3; 4; 5; 7; 9; 11; 15$.

На рис. 4 приведены профили температуры вещества на четыре момента времени ($ct = 18; 30; 150; 360$) для TVD-схемы. В качестве *точного* решения брались результаты на сильно измельченной сетке. Из рисунка видно, что результаты для различных геометрий практически совпадают. Схемы TVD с расширенным шаблоном для ограничителя и без него дали практически одинаковые результаты.

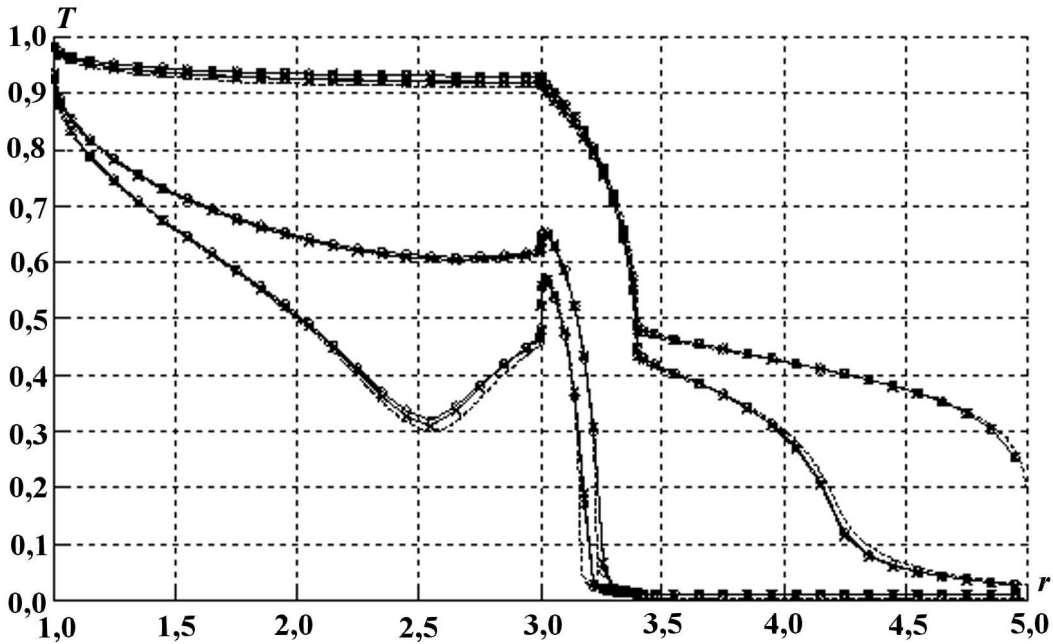


Рис. 4. Температура вещества $T(\vec{r}, t)$: - - - точное решение; o — RZ-геометрия; x — сферически-симметричная геометрия

Задача 2. Задача построена на основе [7]. Выбранное точное решение в моноэнергетическом случае имеет вид тепловой волны, линейно распространяющейся вдоль оси Z :

$$T(\vec{r}, t) = \begin{cases} \xi, & T > T^0; \\ T^0, & T \leq T^0; \end{cases} \quad I(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = \begin{cases} Bf, & I > B^0; \\ B^0, & I \leq B^0; \end{cases}$$

$$\xi(\vec{r}, t) = \beta_0 z + \nu_0 t; \quad E(T) = \frac{4\pi\kappa_0(F-1)}{\nu_0} B; \quad \kappa(T) = \frac{4\kappa_0}{T};$$

$$\gamma = \frac{\beta_0}{\kappa_0 + \nu_0 c^{-1}}; \quad \delta = \frac{\kappa_0}{\beta_0}; \quad f(\vec{\Omega}) = \frac{\delta\gamma}{(1 + \gamma\mu)}; \quad F = \delta \operatorname{arth} \gamma.$$

Использовались следующие параметры: $\beta_0 = 0,1; \nu_0 = 0,01; \kappa_0 = 500; c = 3000$. Задача решалась в прямоугольной области ($10 \leq r \leq 15, 1 \leq z \leq 11$).

Результаты расчетов, проведенных с параметрами $\hat{i} = 30, \hat{j} = 15$ на двух типах неортогональных сеток, приводятся на рис. 5, 6 (см. также цветную вкладку) на момент $ct = 12$. Из рис. 5 видно, что, за исключением St-схемы, результаты по всем остальным схемам практически совпали с точным решением. На *комбинированной* сетке (см. рис. 6) лучше всех ведет себя DDAD-схема; схемы типа TVD показывают значительно лучший результат по сравнению с St-схемой, причем применение расширенного шаблона для ограничителя, вообще говоря, может повышать точность.

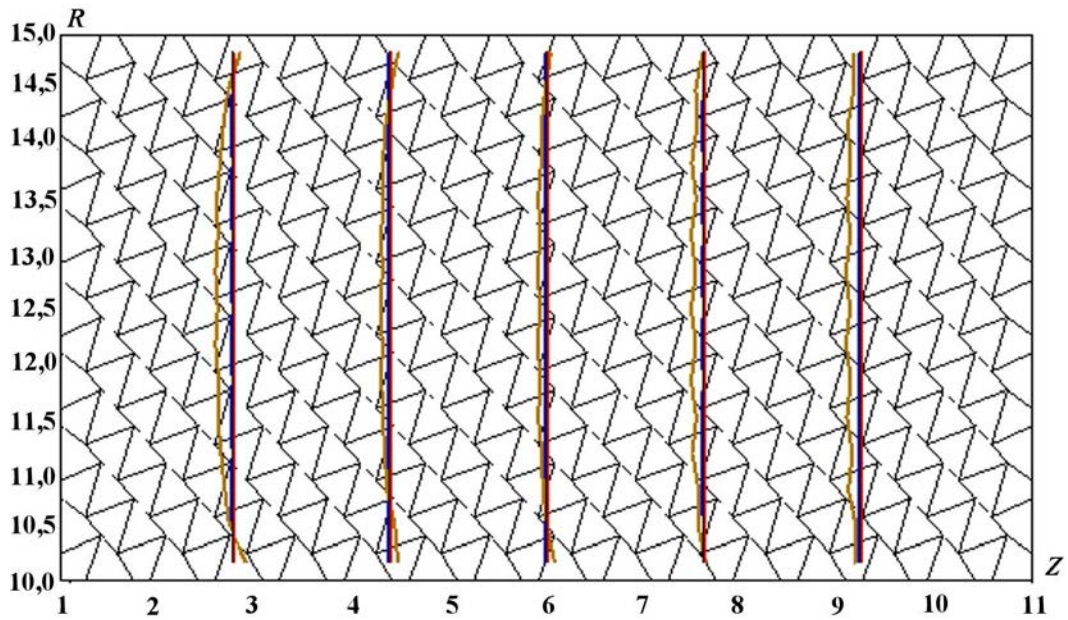


Рис. 5. Изолинии $T(\vec{r}, t)$ на сетке типа *рабица*, $ct = 12$

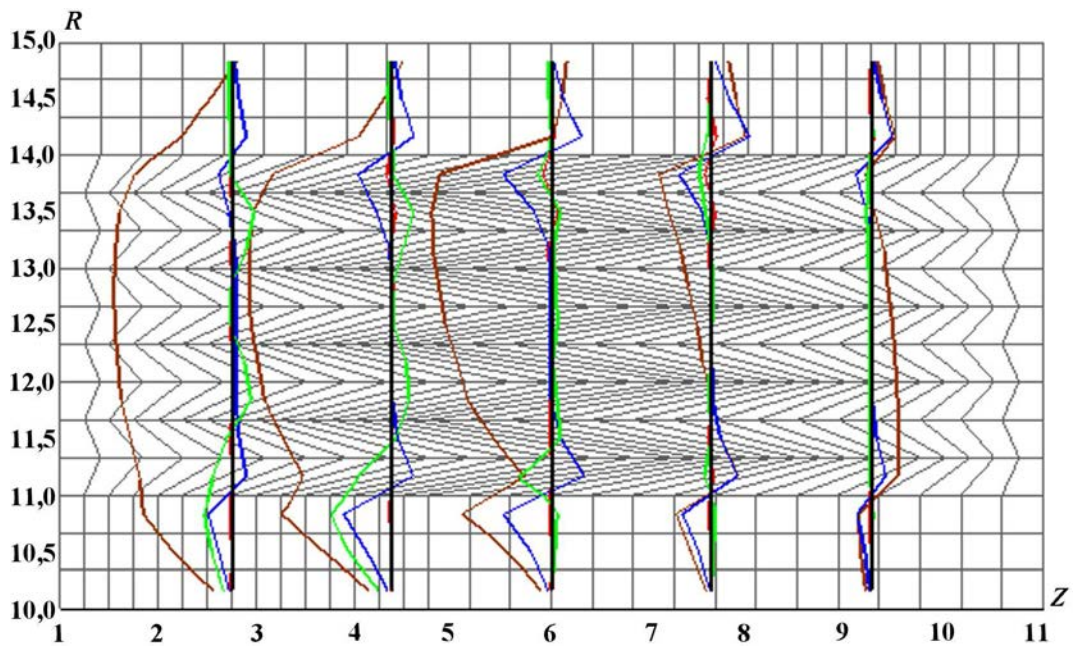


Рис. 6. Изолинии $T(\vec{r}, t)$ на *комбинированной* сетке, $ct = 12$

Заключение

В данной работе реализована неявная схема типа TVD для решения уравнения переноса теплового излучения в двумерной RZ -геометрии на произвольных четырехугольных сетках. В схеме используется ограничитель, который вычисляется явно по известным величинам с предыдущего временного шага на трехточечном шаблоне в каждом направлении. Эта схема сочетает в себе консервативность, монотонность в смысле методологии TVD-схем и второй порядок аппроксимации по пространству, кроме отдельных точек с экстремумами.

Кроме того, предложенная схема TVD обладает следующими достоинствами:

1. Простота реализации — повышение точности достигается при незначительном усложнении алгоритма St-схемы.
2. Сопоставимое с St-схемой число итераций за счет монотонности численного решения и отсутствия переключений.
3. Поскольку TVD-реконструкция производится для неосвещенных сторон в ячейке, то это позволяет дополнительно увеличить точность в ячейках, где освещена только одна сторона.

На основании численных расчетов, приведенных в данной статье, можно сделать вывод, что использование схемы типа TVD дает монотонное решение и порядок аппроксимации заметно выше первого.

Приложение

Рассмотрим порядок аппроксимации предложенной TVD-схемы для линейного уравнения переноса $\frac{\partial I}{\partial t} + c\mu \frac{\partial I}{\partial x} = 0$, которое получается из системы (1) в вакууме в плоской геометрии. Пусть для упрощения $c\mu = 1$, тогда

$$\frac{I_{i+1/2}^{n+1} - I_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{I_{i+1}^{n+1} - I_i^{n+1}}{h} = 0.$$

Разложим I в ряд Тейлора в точке $(i + 1/2, n + 1)$, получим

$$\begin{aligned} \frac{I_{i+1/2}^{n+1} - I_{i+1/2}^n}{\tau} &= \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial t} - \left(\frac{\tau}{2!} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial t^2} - \frac{\tau^2}{3!} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial t^3} + \frac{\tau^3}{4!} \frac{\partial^4 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial t^4} + O(\tau^4) \right); \\ \frac{I_{i+1}^{n+1} - I_i^{n+1}}{h} &= \frac{1}{h} \left(I_{i+1/2}^{n+1} - I_{i-1/2}^{n+1} + \frac{L_{i+1/2}^{n+1} - L_{i-1/2}^{n+1}}{2} \right) = \\ &= \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} - \left(\frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} - \frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^3} + O(h^3) \right) + \frac{L_{i+1/2}^{n+1} - L_{i-1/2}^{n+1}}{2h} = \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} + \tilde{I}. \end{aligned}$$

Возьмем для простоты простейший TVD-ограничитель $L = \min \text{mod}$, в этом случае возможны следующие варианты:

$$\begin{aligned} L_{i+1/2}^{n+1} &= \begin{cases} I_{i+3/2}^{n+1} - I_{i+1/2}^{n+1} = h \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + \frac{h^3}{6} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^3} + O(h^4); \\ I_{i+1/2}^{n+1} - I_{i-1/2}^{n+1} = h \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} - \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + \frac{h^3}{6} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^3} + O(h^4); \\ 0; \end{cases} \\ L_{i-1/2}^{n+1} &= \begin{cases} I_{i+1/2}^{n+1} - I_{i-1/2}^{n+1} = h \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} - \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + \frac{h^3}{6} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^3} + O(h^4); \\ I_{i-1/2}^{n+1} - I_{i-3/2}^{n+1} = h \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} - \frac{3h^2}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + \frac{7h^3}{6} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^3} + O(h^4); \\ 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Пусть $L_{i+1/2}^{n+1} = 0$ (аналогично рассматривается случай $L_{i-1/2}^{n+1} = 0$), тогда $\text{sign} \left(I_{i+3/2}^{n+1} - I_{i+1/2}^{n+1} \right) \neq \neq \text{sign} \left(I_{i+1/2}^{n+1} - I_{i-1/2}^{n+1} \right)$ и, пренебрегая членами $O(h^3)$, получаем $\left| \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} \right| < \left| \frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} \right|$ и

$\tilde{I} < \left| \frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} \right| + O(h^2)$. Заметим, что при линейном решении производные выше первой равны нулю и даже при $L_{i+1/2}^{n+1} = 0$, $L_{i-1/2}^{n+1} = 0$, $L_{i+1/2} = L_{i-1/2}$ имеем точную аппроксимацию $\frac{I_{i+1}^{n+1} - I_i^{n+1}}{h} = \frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x}$. В случае строго монотонно возрастающей или строго монотонно убывающей функции получаем второй порядок аппроксимации. Далее в таблице приведены девять практически возможных ситуаций.

Порядок аппроксимации для различных случаев поведения решения

Номер ситуации	$\frac{L_{i+1/2}^{n+1} - L_{i-1/2}^{n+1}}{h}$	Остаточный член \tilde{I}	Порядок аппроксимации
1	$h \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$\frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^3} + O(h^3)$	$O(h^2)$
2	$2h \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$-\frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$O(h)$
3	$\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} + \frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{2\partial x} - \frac{h}{4} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$O(h)$
4	0	$-\frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$O(h^2)$
5	$h \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$-\frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^3} + O(h^3)$	$O(h^2)$
6	$\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} - \frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{2\partial x} - \frac{3h}{4} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$O(h)$
7	$-\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} + \frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$-\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{2\partial x} - \frac{h}{4} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$O(h)$
8	$-\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x} + \frac{3h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$-\frac{\partial I_{i+1/2}^{n+1}}{2\partial x} + \frac{h}{4} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$O(h)$
9	0	$-\frac{h}{2} \frac{\partial^2 I_{i+1/2}^{n+1}}{\partial x^2} + O(h^2)$	$O(h^2)$

Список литературы

1. *Басс Л. П., Волощенко А. М., Гермогенова Т. А.* Методы дискретных ординат в задачах о переносе излучения. М.: ИПМ АН СССР, 1986.
2. *Гаджиев А. Д., Селезнев В. Н., Шестаков А. А.* DS_n -метод с искусственной диссипацией и ВДМ-метод ускорения итераций для численного решения двумерного уравнения переноса теплового излучения в кинетической модели // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 2. С. 33–46.
3. *Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.

4. *Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Шестаков А. А.* Применение TVD-подхода к DS_n -методу решения уравнения переноса теплового излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 37–48.
5. *Osher S., Chakravarthy S.* High resolution schemes and the entropy condition // SIAM J. Numer. Anal. 1984. Vol. 21(5). P. 955–984.
6. *Fleck J. A., Cummings J. D.* An implicit Monte-Carlo scheme for calculating time and frequency dependent nonlinear radiation transport // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 8. P. 313–342.
7. *Zaviyalov V. V., Gusev V. Y., Vershinskaya A. S.* Exact solutions of radiation and energy transfer equations in 3D spherically non-symmetric geometry // J. Comp. and Appl. Math. 2006. Vol. 189. P. 635–642.

Статья поступила в редакцию 24.09.09.

УДК 517.956.4

АВТОМОДЕЛЬНЫЕ ТЕПЛОВЫЕ ВОЛНЫ ОТ СОСРЕДОТОЧЕННОГО ИЛИ ОБЪЕМНОГО ИСТОЧНИКА В СРЕДЕ С НЕОДНОРОДНЫМИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ

Б. П. Тихомиров
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Обсуждается вопрос о сопряжении на плоской границе раздела сред с разными теплофизическими характеристиками известных автомодельных решений. Поставлена задача об объемном источнике, включающая в себя как частный случай задачу о мгновенном сосредоточенном источнике. Построено точное решение задачи с учетом плотности энергии излучения. Приводятся примеры модельных задач для тестирования методик расчета нелинейной теплопроводности в неоднородной среде без учета и с учетом функции горения.

Ключевые слова: сосредоточенный и объемный источники, тепловая волна, граница раздела сред, согласование автомодельных решений, модельные тестовые задачи.

В работах [1, 2] было получено точное решение задачи о распространении в среде с однородными теплофизическими параметрами тепловой волны от мгновенного сосредоточенного источника. В настоящей работе эта задача обобщается на случай мгновенного выделения энергии на границе раздела сред с разными теплофизическими параметрами. Рассматривается также задача об объемном источнике специального вида, включающая в себя как частный случай задачу о мгновенном сосредоточенном источнике. В нелинейное уравнение теплопроводности вводится функция горения, прямо пропорциональная энергии и обратно пропорциональная времени. Уравнение решается в полупространстве с заданным температурным режимом на границе и в неограниченном пространстве с заданным степенным законом возрастания энергии.

Рассматриваемые задачи о сосредоточенном и объемном источниках в среде с распределенными теплофизическими параметрами имеют точные решения. В общем виде их можно найти в справочнике по точным решениям уравнений тепло- и массопереноса [3].

Работа состоит из трех разделов. В первом разделе приводится автомодельное решение для случая мгновенного выделения энергии на плоской границе полупространства и обсуждается вопрос о сопряжении автомодельных решений на границе раздела сред с разными теплофизическими параметрами. Во втором разделе формулируется задача об объемном источнике, описывается автомодельное решение и рассматривается вопрос о согласовании решений на плоской границе раздела сред. Строится точное решение задачи с учетом плотности энергии излучения в случаях плоской, цилиндрической и сферической симметрий. В последнем разделе приводятся конкретные примеры модельных задач. Эти задачи могут использоваться для тестирования численных методов решения задач нелинейной теплопроводности в неоднородной среде.

1. Мгновенное выделение энергии на границе раздела сред с разными теплофизическими параметрами

Среда с распределенной плотностью. Формулы автомодельного решения. Будем рассматривать задачу о распространении тепла путем лучистой теплопроводности в неподвижной среде. Процесс описывается уравнением

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\ell c}{3} \frac{\partial \sigma T^4}{\partial x} \right),$$

где t — время; x — координата; E — удельная внутренняя энергия; T — температура; ρ — плотность; ℓ — длина свободного пробега фотонов; c — скорость света; σ — постоянная Стефана.

Предполагаем, что внутренняя энергия подчиняется уравнению состояния вида $E = c_V T$, где c_V — удельная теплоемкость при постоянном объеме, являющаяся степенной функцией температуры ($c_V = c_{V_0} T^{k-1}$). Плотностью энергии излучения пренебрегаем.

Будем считать, что длина пробега фотонов является степенной функцией температуры и плотности:

$$\ell = \ell_0 \frac{T^\alpha}{\rho^\beta},$$

что плотность не меняется с течением времени и степенным образом зависит от пространственной координаты:

$$\rho = \rho_0 |x|^\mu.$$

Тогда уравнение лучистой теплопроводности можно записать в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(b |x|^\mu T^k \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{a}{|x|^\nu} T^n \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (1)$$

где

$$b = \rho_0 c_{V_0}; \quad a = \frac{4}{3} \frac{\ell_0 \sigma c}{\rho_0^\beta}; \quad n = 3 + \alpha; \quad \nu = \mu \beta.$$

На показатель степени μ накладывается естественное ограничение $1 + \mu > 0$, вытекающее из требования конечности массы в ограниченной области, содержащей точку $x = 0$. Кроме того, потребуем, чтобы выполнялись неравенства $2 + \mu + \nu > 0$; $n + 1 - k > 0$. Далее уравнение (1) будем рассматривать в полупространстве $x > 0$.

Точное решение задачи о распространении тепла в неограниченной среде при мгновенном выделении энергии Q в точке $x = 0$ было построено в работах [1, 2] для случаев плоской ($\mu = \nu = 0$), цилиндрической ($\mu = 1, \nu = -1$) и сферической ($\mu = 2, \nu = -2$) симметрий.

Приведем формулы точного решения для произвольных показателей степеней μ, ν , удовлетворяющих указанным выше неравенствам.

По постановке задачи температура, кроме уравнения (1), удовлетворяет также условию сохранения энергии

$$\int_0^\infty b x^\mu T^k dx = Q.$$

Введем следующие обозначения:

$$A = \left(\frac{Q^{2+\mu+\nu}}{a^{1+\mu} b^{1+\nu}} \right)^{\frac{1}{(1+\mu)(n+1)+(1+\nu)k}}; \quad B = \left[\left(\frac{a}{Q} \right)^k \left(\frac{Q}{b} \right)^{n+1} \right]^{\frac{1}{(1+\mu)(n+1)+(1+\nu)k}}; \quad (2)$$

$$q = \frac{-(1+\mu)}{(1+\mu)(n+1) + (1+\nu)k}; \quad \delta = \frac{k}{(1+\mu)(n+1) + (1+\nu)k}.$$

Решение задачи зависит от параметров a, b, Q и, очевидно, является автомодельным, так как из определяющих параметров и независимых переменных можно составить единственную безразмерную комбинацию

$$\xi = \frac{x}{Bt^\delta}.$$

Решение можно представить в виде

$$T(x, t) = At^q f(\xi), \quad (3)$$

где функция $f(\xi)$ удовлетворяет обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка

$$\frac{d}{d\xi} \left(\frac{f^n}{\xi^\nu} \frac{df}{d\xi} \right) + \delta \frac{d}{d\xi} \left(\xi^{1+\mu} f^k \right) = 0$$

и условию сохранения энергии

$$\int_0^{\xi_0} \xi^\mu f^k(\xi) d\xi = 1.$$

Интегрируя дифференциальное уравнение с учетом равенства нулю температуры и потока на фронте тепловой волны, получаем

$$f(\xi) = \left\{ \delta \frac{n+1-k}{2+\mu+\nu} \xi_0^{2+\mu+\nu} \left[1 - \left(\frac{\xi}{\xi_0} \right)^{2+\mu+\nu} \right] \right\}^{\frac{1}{n+1-k}}, \quad 0 \leq \xi \leq \xi_0. \quad (4)$$

Из условия сохранения энергии можно найти постоянную интегрирования

$$\xi_0 = \left\{ \left[\frac{2+\mu+\nu}{\delta(n+1-k)} \right]^k \left[\frac{(1+\mu) \Gamma \left(1 + \frac{1+\mu}{2+\mu+\nu} + \frac{k}{n+1-k} \right)}{\Gamma \left(1 + \frac{1+\mu}{2+\mu+\nu} \right) \Gamma \left(1 + \frac{k}{n+1-k} \right)} \right]^{n+1-k} \right\}^{\frac{1}{(1+\mu)(n+1)+(1+\nu)k}}, \quad (5)$$

где Γ — гамма-функция. Постоянная интегрирования определяет положение фронта тепловой волны

$$x_\Phi = \xi_0 B t^\delta.$$

Итак, решение поставленной задачи описывается соотношениями (3), (4). При $\mu = \nu = 0$ и $k = 1$ оно переходит в решение классической задачи о мгновенном плоском источнике, рассмотренной в работе [1].

Структура решения в окрестности точки $x = 0$ зависит от показателей степеней μ, ν . Нетрудно проверить, что поток тепла в точке $x = 0$ равен нулю. Производная обращается в нуль, когда $1 + \mu + \nu > 0$; принимает некоторое конечное значение, отличное от нуля, если $1 + \mu + \nu = 0$; обращается в бесконечность при $1 + \mu + \nu < 0$.

Сопряжение решений на плоской границе раздела сред. Пусть среда в левом полупространстве имеет теплофизические параметры $a_1, b_1, k_1, n_1, \mu_1, \nu_1$, а в правом — $a_2, b_2, k_2, n_2, \mu_2, \nu_2$. Требуется определить температурное поле после мгновенного выделения энергии Q в плоскости $x = 0$.

Решение этой задачи легко построить с помощью решений двух вспомогательных задач о мгновенном плоском источнике. В первой задаче рассматривается левая половина геометрии исходной задачи, во второй — правая. Плоскость $x = 0$, в которой мгновенно выделяется энергия Q_i , где i — номер вспомогательной задачи, является теплоизолированной стенкой. Она разделяет температурное поле на не связанные друг с другом температурные поля левого и правого полупространств. Эти поля описываются точным решением, представленным в предыдущем подразделе. В формулы

точного решения подставляются теплофизические параметры i -й вспомогательной задачи, энерговыделение берется равным Q_i .

Чтобы построить точное решение основной задачи, нужно согласовать температурные поля так, чтобы на границе $x = 0$ были непрерывны температура и тепловой поток. Непрерывность потока обеспечена автоматически, так как тепловой поток, как уже отмечалось, обращается на границе в нуль.

Для согласования температур на границе нужно прежде всего потребовать, чтобы зависимость температуры от времени слева и справа от плоскости энерговыделения была одинаковой. Это требование выполняется, когда показатели степени, в которую возводится время в формуле (3) слева и справа от границы, совпадают:

$$\frac{1 + \mu_1}{(1 + \mu_1)(n_1 + 1) + (1 + \nu_1)k_1} = \frac{1 + \mu_2}{(1 + \mu_2)(n_2 + 1) + (1 + \nu_2)k_2}. \quad (6)$$

Из условия непрерывности температуры имеем

$$\begin{aligned} \left(\delta_1 \frac{n_1 + 1 - k_1}{2 + \mu_1 + \nu_1} \xi_{01}^{2+\mu_1+\nu_1} \right)^{\frac{1}{n_1+1-k_1}} \left(\frac{Q_1^{2+\mu_1+\nu_1}}{a_1^{1+\mu_1} b_1^{1+\nu_1}} \right)^{\frac{1}{(1+\mu_1)(n_1+1)+(1+\nu_1)k_1}} = \\ = \left(\delta_2 \frac{n_2 + 1 - k_2}{2 + \mu_2 + \nu_2} \xi_{02}^{2+\mu_2+\nu_2} \right)^{\frac{1}{n_2+1-k_2}} \left(\frac{Q_2^{2+\mu_2+\nu_2}}{a_2^{1+\mu_2} b_2^{1+\nu_2}} \right)^{\frac{1}{(1+\mu_2)(n_2+1)+(1+\nu_2)k_2}}, \end{aligned} \quad (7)$$

где ξ_{01} , ξ_{02} — константы, определяемые по формуле (5). Они характеризуют положение фронта тепловой волны соответственно в левом и правом полупространствах.

Присоединяя к соотношению (7) уравнение баланса энергии

$$Q_1 + Q_2 = Q, \quad (8)$$

получаем замкнутую систему для определения неизвестных величин Q_1 , Q_2 . Нетрудно убедиться, что эта система имеет единственное положительное решение.

Таким образом, задача о мгновенном выделении энергии на плоской границе сред с разными теплофизическими параметрами имеет точное решение, если показатели степени, входящие в уравнение теплопроводности (1), удовлетворяют соотношению (6). В каждом полупространстве точное решение задачи описывается формулами (3), (4), в которых в качестве констант берутся соответствующие данному полупространству теплофизические параметры, а величина Q заменяется на энерговыделение в полупространстве. Энерговыделение в каждом полупространстве определяется из системы уравнений (7), (8).

В частном случае $\mu_i = \nu_i = 0$, $k_i = 1$ имеем $n_i = n$, $\xi_{0i} = \xi_0$. Соотношение (7) переходит в выражение

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \sqrt{\frac{a_1 b_1}{a_2 b_2}},$$

показывающее, что отношение энергий в левом и правом полупространствах равно квадратному корню из произведения отношений коэффициентов теплопроводности и коэффициентов объемных теплоемкостей. Выделившаяся в i -м полупространстве энергия находится по формуле

$$Q_i = \frac{\sqrt{a_i b_i}}{\sqrt{a_1 b_1} + \sqrt{a_2 b_2}} Q, \quad i = 1, 2.$$

Отношение размеров прогретых зон слева и справа от плоскости энерговыделения в этом частном случае не зависит от времени и определяется соотношением

$$\frac{x_{\Phi}^{(1)}}{x_{\Phi}^{(2)}} = \sqrt{\frac{a_1}{a_2} \frac{b_2}{b_1}}.$$

2. Задача об объемном источнике

Распространение тепла при степенном температурном режиме на границе. Рассмотрим в полупространстве уравнение нелинейной теплопроводности с объемным источником, мощность которого является однородной функцией температуры:

$$\frac{\partial}{\partial t} (bx^\mu T^k) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{a}{x^\nu} T^n \frac{\partial T}{\partial x} \right) + F(x, t, T). \quad (9)$$

В начальный момент времени температура равна нулю:

$$T(x, 0) = 0, \quad x > 0.$$

На левой границе задан закон изменения температуры:

$$T(0, t) = T_0 t^q.$$

Решение данной задачи зависит от размерных параметров T_0 , a , b и от размерных констант, входящих в функцию источника. Выберем эту функцию так, чтобы решение рассматриваемой задачи было автомодельным и представлялось в конечной замкнутой форме.

Анализ условий автомодельности задачи и структуры обыкновенного дифференциального уравнения, которому удовлетворяет безразмерная функция автомодельной переменной, показывает, что функцию источника можно взять в виде

$$F(x, t, T) = sb \frac{x^\mu}{t} T^k, \quad (10)$$

где

$$s = \frac{1 + \mu + q[(1 + \mu)(n + 1) + (1 + \nu)k]}{2 + \mu + \nu}.$$

Действительно, очевидно, что задача без источника автомодельна. Включение в уравнение теплопроводности указанной функции источника не приводит к появлению дополнительных размерных констант и, следовательно, не нарушает условий автомодельности задачи.

В качестве независимой переменной возьмем безразмерную комбинацию

$$\xi = \frac{1}{\left(\frac{a}{b} T_0^{n+1-k}\right)^{\frac{1}{2+\mu+\nu}}} \frac{x}{t^\delta}, \quad \delta = \frac{1 + q(n + 1 - k)}{2 + \mu + \nu}$$

и будем искать автомодельное решение в виде

$$T(x, t) = T_0 t^q f(\xi), \quad (11)$$

где безразмерная функция $f(\xi)$ удовлетворяет следующей краевой задаче:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{f^n}{\xi^\nu} \frac{df}{d\xi} \right) + \delta \frac{d}{d\xi} (\xi^{1+\mu} f^k) &= 0; \\ f(0) = 1; \quad f(\xi_0) = 0; \quad \frac{f^n}{\xi^\nu} \frac{df}{d\xi} \Big|_{\xi=\xi_0} &= 0. \end{aligned}$$

Если показатели степени μ , ν , n , k удовлетворяют указанным в первом разделе неравенствам, решение данной краевой задачи существует и имеет вид

$$f(\xi) = \left[1 - \left(\frac{\xi}{\xi_0} \right)^{2+\mu+\nu} \right]^{\frac{1}{n+1-k}} \quad \text{при } 0 \leq \xi \leq \xi_0,$$

где

$$\xi_0 = \left[\frac{2 + \mu + \nu}{(n + 1 - k)\delta} \right]^{\frac{1}{2+\mu+\nu}}.$$

Эта константа определяет положение фронта тепловой волны

$$x_\Phi = \xi_0 \left(\frac{a}{b} T_0^{n+1-k} \right)^{\frac{1}{2+\mu+\nu}} t^\delta.$$

Итак, решение уравнения (9) с функцией источника (10) при заданной температуре на границе представимо в конечной замкнутой форме (11). Энергия находится по формуле

$$\int_0^{x_\Phi} b x^\mu T^k dx = Q t^s,$$

где

$$Q = \frac{1}{1 + \mu} b T_0^k \left[\frac{2 + \mu + \nu}{(n + 1 - k)\delta} \frac{a}{b} T_0^{n+1-k} \right]^{\frac{1+\mu}{2+\mu+\nu}} \frac{\Gamma\left(1 + \frac{1 + \mu}{2 + \mu + \nu}\right) \Gamma\left(1 + \frac{k}{n + 1 - k}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{1 + \mu}{2 + \mu + \nu} + \frac{k}{n + 1 - k}\right)}.$$

Рассмотрим некоторые частные случаи.

1. Пусть $\mu = w$, $\nu = -w$. Предположим, что объемная теплоемкость и коэффициент теплопроводности не содержат явной зависимости от координаты. Тогда уравнение (9) описывает распространение тепла для плоской, цилиндрической и сферической симметрий соответственно при $w = 0, 1, 2$.

Точное решение находится по формулам

$$T(x, t) = T_0 t^q \left[1 - \left(\frac{x}{x_\Phi} \right)^2 \right]^{\frac{1}{n+1-k}}, \quad x_\Phi = \left[\frac{2}{(n + 1 - k)\delta} \frac{a}{b} T_0^{n+1-k} \right]^{0,5} t^\delta, \quad \delta = \frac{1 + q(n + 1 - k)}{2}.$$

Константа, входящая в функцию источника, равна

$$s = \frac{1}{2} \left\{ 1 + w + q \left[(1 + w)(n + 1) + (1 - w)k \right] \right\}.$$

2. Пусть $q = 0$, т. е. на левой границе поддерживается постоянная температура. В этом случае расчетные формулы упрощаются, особенно при дополнительном условии $\mu = w$, $\nu = -w$.
3. Пусть $s = 0$ (отсутствует источник). Этот случай реализуется, когда на границе задан температурный режим

$$q = - \frac{1 + \mu}{(1 + \mu)(n + 1) + (1 + \nu)k}.$$

Нетрудно убедиться, что в такой постановке задача эквивалентна задаче о мгновенном плоском источнике, рассмотренной в первом разделе.

Таким образом, постановка задачи о тепловом источнике, действующем в прогретой области, включает в себя как частный случай постановку задачи о мгновенном плоском источнике.

Задача об объемном источнике в неограниченном пространстве. Связь между задачами о сосредоточенном и объемном источниках становится еще очевиднее, если сформулировать последнюю в другой, эквивалентной форме, что всегда можно сделать, так как в задаче об объемном источнике поток в точке $x = 0$ равен нулю. Это означает, что с момента времени $t > 0$, когда уже

произошло *зажигание* топлива, т. е. включился тепловой источник, задавать температуру на границе совершенно не обязательно. Она автоматически будет поддерживаться на требуемом уровне за счет действия источника.

Рассмотрим задачу об объемном источнике в неограниченном пространстве. Распространение тепла описывается уравнением (9), в которое введен источник вида (10). Будем предполагать, что константа Q в законе возрастания энергии

$$\int_0^{\infty} b x^{\mu} T^k dx = Q t^s,$$

соответствующем заданному источнику, известна и что источник включается в начальный момент времени в точке $x = 0$.

В силу симметрии относительно плоскости $x = 0$ интегрирование производится по полупространству. В задачах с плоской симметрией интеграл дает половину энергии прогретой области.

Решение данной задачи автомодельное. Оно зависит от параметров a, b, Q , строится по той же схеме, что и в первом разделе, и совпадает с формулами (3), (4), в которых вместо констант (2) следует взять величины

$$q = \frac{(2 + \mu + \nu) s - (1 + \mu)}{(1 + \mu)(n + 1) + (1 + \nu)k}, \quad \delta = \frac{k + (n + 1 - k) s}{(1 + \mu)(n + 1) + (1 + \nu)k}. \quad (12)$$

Легко проверить, что данное решение совпадает с решением (11), если в качестве констант взять величины (5), (12) и положить

$$T_0 = \left(\delta \frac{n + 1 - k}{2 + \mu + \nu} \xi_0^{2 + \mu + \nu} \right)^{\frac{1}{n + 1 - k}} A.$$

Рассмотрим теперь задачу об объемном источнике в случае, когда левое и правое полупространства имеют разные теплофизические параметры.

Будем считать, что имеет место энергетическое соотношение

$$\int_{-\infty}^0 b_1 |x|^{\mu_1} T^{k_1} dx + \int_0^{\infty} b_2 x^{\mu_2} T^{k_2} dx = Q t^s, \quad s \geq 0. \quad (13)$$

Построим в каждом полупространстве точное решение, взяв в качестве энергетических констант пока неизвестные величины Q_i :

$$\int_0^{\infty} b_i x^{\mu_i} T^{k_i} dx = Q_i t^s, \quad i = 1, 2.$$

Из условия непрерывности температуры в точке $x = 0$ и соотношения (13) следуют уравнения (7), (8) и правило согласования показателей степени, гарантирующее существование составного автомодельного решения:

$$\frac{(2 + \mu_1 + \nu_1) s - (1 + \mu_1)}{(1 + \mu_1)(n_1 + 1) + (1 + \nu_1)k_1} = \frac{(2 + \mu_2 + \nu_2) s - (1 + \mu_2)}{(1 + \mu_2)(n_2 + 1) + (1 + \nu_2)k_2}.$$

Уравнения (7), (8) образуют систему для определения энергетических констант. Эта система имеет единственное положительное решение.

Рассмотрим теперь общий случай. Предположим, что выполняются следующие энергетические соотношения:

$$\int_{-\infty}^0 b_1 |x|^{\mu_1} T^{k_1} dx = Q_1 t^{s_1}, \quad s_1 \geq 0; \quad \int_0^{\infty} b_2 x^{\mu_2} T^{k_2} dx = Q_2 t^{s_2}, \quad s_2 \geq 0.$$

Тогда решение в каждом полупространстве описывается формулами (3), (4). Решение существует, если выполняется равенство (7) и показатели степени удовлетворяют соотношению

$$\frac{(2 + \mu_1 + \nu_1) s_1 - (1 + \mu_1)}{(1 + \mu_1)(n_1 + 1) + (1 + \nu_1)k_1} = \frac{(2 + \mu_2 + \nu_2) s_2 - (1 + \mu_2)}{(1 + \mu_2)(n_2 + 1) + (1 + \nu_2)k_2}.$$

Учет плотности энергии излучения в задаче о тепловом источнике. Рассмотрим уравнение теплопроводности с учетом плотности энергии излучения в случаях плоской, цилиндрической и сферической симметрий:

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{x^w} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^w a T^n \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1+w}{2} \rho \frac{E}{t}, \quad x \geq 0, \quad w = 0, 1, 2; \quad E = c_V T^k + \frac{\sigma T^4}{\rho}.$$

Уравнение содержит размерные константы, из которых можно образовать комбинацию с размерностью температуры, а вместе с независимыми переменными и безразмерную комбинацию. Поэтому для автомодельности решения нужно потребовать, чтобы при задании начальных данных и граничного условия не появлялись константы с независимыми размерностями.

Пусть в начальный момент времени температура равна нулю, а на границе $x = 0$ задана температура $T_0 = \left(\frac{\rho c_V}{\sigma} \right)^{\frac{1}{4-k}}$. Введем автомодельную переменную $\xi = \frac{x}{Bt^{0,5}}$, где $B = \left[\frac{a}{\rho c_V} \left(\frac{\rho c_V}{\sigma} \right)^{\frac{n+1-k}{4-k}} \right]^{0,5}$, и будем искать решение задачи в виде

$$T(x, t) = T_0 f(\xi).$$

После подстановки этого выражения в исходное уравнение получаем для определения функции $f(\xi)$ обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi^w f^n \frac{df}{d\xi} \right) + \frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^{w+1} (f^k + f^4) \right) = 0$$

с краевыми условиями

$$f(0) = 1; \quad f|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad \xi^w f^n \frac{df}{d\xi} \Big|_{\xi=\xi_0} = 0.$$

Однократное интегрирование с учетом условий на фронте тепловой волны приводит к уравнению

$$\frac{f^{n-k} df}{1 + f^{4-k}} + \frac{1}{4} d(\xi^2) = 0.$$

Оно легко интегрируется. Простые выражения получаются, например, в следующих случаях:

1. $n = 3$.

$$T(x, t) = T_0 \left\{ \exp \left(\ln 2 \left[1 - \left(\frac{x}{x_\Phi} \right)^2 \right] \right) - 1 \right\}^{\frac{1}{4-k}}, \quad x_\Phi = \left(\frac{4}{4-k} \ln 2 \right)^{0,5} Bt^{0,5}. \quad (14)$$

2. $n = 6; \quad k = 1$.

$$T(x, t) = T_0 f \left(\frac{x}{x_\Phi} \right), \quad 0 \leq x \leq x_\Phi, \quad x_\Phi = \left(4 \frac{1 - \ln 2}{3} \right)^{0,5} Bt^{0,5}.$$

3. $n = 9; \quad k = 1$.

$$T(x, t) = T_0 f \left(\frac{x}{x_\Phi} \right), \quad 0 \leq x \leq x_\Phi, \quad x_\Phi = \left(2 \frac{2 \ln 2 - 1}{3} \right)^{0,5} Bt^{0,5}. \quad (15)$$

Значения функций $f\left(\frac{x}{x_\Phi}\right)$ в случаях 2, 3 находятся соответственно из нелинейных уравнений

$$f^3 - \ln(1 + f^3) = (1 - \ln 2) \left[1 - \left(\frac{x}{x_\Phi}\right)^2 \right];$$

$$f^6 - 2f^3 + 2\ln(f^3 + 1) = (2\ln 2 - 1) \left[1 - \left(\frac{x}{x_\Phi}\right)^2 \right].$$

Закон выделения энергии с точностью до множителя, зависящего от типа симметрии, описывается формулой

$$J = \sigma T_0^4 (\xi_0 B)^{1+w} Q_n^w t^{\frac{1+w}{2}}, \quad Q_n^w = \int_0^1 \left(f(z) + f^4(z) \right) z^w dz.$$

Индекс w указывает тип симметрии; индекс n совпадает со значением показателя степени температуры (3, 6, 9) в коэффициенте теплопроводности. Значения интегралов приведены в таблице.

Значения константы Q_n^ω для разных коэффициентов теплопроводности

Показатель степени	Тип симметрии		
	0	1	2
3	1,37573	0,54101	0,30418
6	1,60673	0,69833	0,42095
9	1,71405	0,77610	0,48216

3. Примеры модельных задач

Мгновенный плоский источник. Теплоемкость зависит от температуры. Уравнения:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(T^2 \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad -2 \leq x < 0;$$

$$\frac{\partial T^{1,5}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{75}{16} T^{1,5} \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad 0 < x \leq 5.$$

Расчетная область: $-2 \leq x \leq 5$.

В момент времени $t = 0$ в плоскости $x = 0$ выделяется энергия $Q = 1,4375\pi$. Закон распространения тепловых волн: $x_\Phi^{(1)} = -2t^{0,25}$; $x_\Phi^{(2)} = 5t^{0,375}$. В качестве начальных данных берется распределение температуры в момент времени $t = 0,00065536$ ($-0,32 \leq x \leq 0,32$).

Задача решается до момента времени $t = 1$. Решение описывается формулой

$$T(x, t) = t^{-0,25} f\left(\frac{x}{x_\Phi}\right), \quad f\left(\frac{x}{x_\Phi}\right) = \begin{cases} \left[1 - \left(\frac{x}{x_\Phi^{(1)}}\right)^2 \right]^{0,5}, & x_\Phi^{(1)} \leq x \leq 0, \\ 1 - \left(\frac{x}{x_\Phi^{(2)}}\right)^2, & 0 < x \leq x_\Phi^{(2)}. \end{cases}$$

Распределение энергии по областям: $Q_1 = 0,5\pi$; $Q_2 = 0,9375\pi$.

Объемный источник. Плоская, цилиндрическая и сферическая геометрии. Уравнение:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{x^w} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^w T^4 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1+w}{2} \frac{T}{t}, \quad x > 0, \quad w = 0, 1, 2.$$

Решение ищется в области $0 \leq x \leq 10$.

Возможны две идентичные постановки задачи. В первой постановке на левой границе расчетной области поддерживается постоянная температура, равная единице. В качестве начальных данных задается нулевой профиль температуры. Во второй постановке задачи на левой границе задается нулевой поток тепла. Горение инициируется заданием на участке $[0; 0,1]$ отличного от нуля профиля температуры, который берется на момент времени $t = 0,01$ из формулы точного решения. Закон распространения тепловой волны: $x_\phi = \sqrt{t}$.

Задача решается до момента времени $t = 100$. Точное решение описывается формулой

$$T(x, t) = \begin{cases} \left(1 - \frac{x^2}{t}\right)^{0,25} & \text{при } x \leq \sqrt{t}; \\ 0 & \text{при } x > \sqrt{t}. \end{cases}$$

Энергия системы изменяется с течением времени по закону $J = Qt^{\frac{1+w}{2}}$. Для плоской геометрии $Q = 0,87402$. В случае цилиндрической симметрии $Q = 0,4$, сферической — $Q = 0,24972$. Заметим, что в случае цилиндрической (сферической) геометрии энергия приведена на один радиан (стерадиан).

Объемный источник. Две области. Плоская геометрия. Уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(2T^8 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \frac{T}{t}, & -1 \leq x < 0; \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(T^4 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \frac{T}{t}, & 0 < x \leq 1. \end{aligned}$$

Расчетная область: $-1 \leq x \leq 1$.

Горение инициируется путем задания в момент времени $t = 0,01$ ($-0,1 \leq x \leq 0,1$) отличного от нуля профиля температуры, взятого в соответствии с формулой точного решения. Тепловые волны распространяются вправо и влево с одинаковой скоростью ($x_\phi = \pm\sqrt{t}$).

Задача решается до момента времени $t = 1$. Точное решение описывается формулой

$$T(x, t) = \begin{cases} \left(1 - \frac{x^2}{t}\right)^{0,125} & \text{при } -\sqrt{t} \leq x \leq 0; \\ \left(1 - \frac{x^2}{t}\right)^{0,25} & \text{при } 0 \leq x \leq \sqrt{t}; \\ 0 & \text{при } x < -\sqrt{t} \text{ и } x > \sqrt{t}. \end{cases}$$

Энергия в системе выделяется по закону $J = Q\sqrt{t}$, $Q = Q_1 + Q_2$. В первой области $Q_1 = 0,93088$, во второй — $Q_2 = 0,87402$.

Объемный источник. Теплоемкость зависит от температуры. Уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(2T^4 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + 1,25 \frac{T}{t}, & -1 \leq x < 0; \\ \frac{\partial T^{1,5}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(2T^{4,5} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + 1,375 \frac{T^{1,5}}{t}, & 0 < x \leq 1. \end{aligned}$$

Расчетная область: $-1 \leq x \leq 1$.

В качестве начальных данных берется распределение температуры из точного решения на момент времени $t = 0,1$ ($-0,1 \leq x \leq 0,1$). Тепловые волны распространяются влево и вправо с постоянной скоростью, равной единице.

Задача решается до момента времени $t = 1$. Точное решение описывается формулой

$$T(x, t) = t^{0,25} f\left(\frac{x}{t}\right),$$

где

$$f\left(\frac{x}{t}\right) = \begin{cases} \left[1 - \left(\frac{x}{t}\right)^2\right]^{0,25} & \text{при } -t \leq x \leq t; \\ 0 & \text{при } x < -t \text{ и } x > t. \end{cases}$$

В левом полупространстве выделяется энергия $J_1 = 0,87402 t^{1,25}$, в правом — $J_2 = 0,82624 t^{1,375}$.

Объемный источник. Идеальный газ с излучением. Уравнение:

$$\rho \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\ell c}{3} \frac{\partial \sigma T^4}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \rho \frac{E}{t}, \quad E = c_V T + \frac{\sigma T^4}{\rho}, \quad \ell = \ell_0 T^\alpha, \quad \sigma = 1,37, \quad c = 3000.$$

Расчетная область: $-1,1 \leq x \leq 1,1$.

Слева от точки $x = 0$ плотность равна 0,1, справа — 10. Параметры уравнения состояния и пробега излучения: $c_V = 13,7$, $\ell_0 = 2,70505 \cdot 10^{-4}$, $\alpha = 0$ при $x < 0$ и $c_V = 0,137$, $\ell_0 = 9,70762 \cdot 10^{-4}$, $\alpha = 6$ при $x > 0$.

В начальный момент времени ($t_0 = 0,0004$) температура равна 0,85107 в интервале $-0,02 < x < 0$ и 0,93845 при $0 < x < 0,02$; в остальных точках температура равна нулю. Тепловые волны распространяются вправо и влево с одинаковой скоростью ($x_\Phi = \pm\sqrt{t}$).

Задача решается до момента времени $t = 1$. Точное решение описывается формулами (14) ($n = 3$) и (15) ($n = 9$) соответственно слева и справа от точки $x = 0$.

В левом полупространстве выделяется энергия $J_1 = 1,88475 t^{0,5}$, в правом — $J_2 = 2,34825 t^{0,5}$.

Заметим, что в данной задаче в качестве начальных данных берутся средние значения температур, соответствующие величине энергии, поступившей в систему к моменту времени t_0 . Аналогичным образом можно поступить и в предыдущих задачах, уменьшив начальный момент времени. Например, в первой задаче удобно взять $t_0 = 10^{-8}$ или $t_0 = 2,56 \cdot 10^{-6}$, во второй и третьей задачах — $t_0 = 10^{-4}$, в четвертой задаче — $t_0 = 10^{-2}$.

Список литературы

1. Зельдович Я. Б., Компанеев А. С. К теории распространения тепла при теплопроводности, зависящей от температуры // Сборник, посвященный 70-летию академика А. Ф. Иоффе. М.: Изд-во АН СССР, 1950. С. 61–67.
2. Баренблатт Г. И. О некоторых неустановившихся движениях жидкости и газа в пористой среде // ПММ. 1952. Т. 16. Вып. 1. С. 67–78.
3. Полянин А. Д., Вязьмин А. В., Журов А. И., Казенин Д. А. Справочник по точным решениям уравнений тепло- и массопереноса. М.: Факториал, 1998.

Статья поступила в редакцию 19.10.09.

УДК 519.6

МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ И ГАММА-КВАНТОВ ПРИ ТАБЛИЧНОМ ЗАДАНИИ ГРУППОВЫХ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА ЗАЩИТЫ РЕАКТОРА ВВЭР-1000

О. В. Николаева, Л. П. Басс, В. С. Кузнецов, В. В. Сеница, В. И. Цофин
(ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, РИЦ "Курчатовский институт",
ОКБ "Гидропресс")

Представлен алгоритм, позволяющий находить решения многогруппового уравнения переноса излучения в многомерных геометриях с таблично заданными сечениями рассеяния. Приводятся результаты верификации алгоритма на простой модельной задаче с модельными гладкими сечениями рассеяния. Представлены результаты расчетов плотностей потоков нейтронов и гамма-квантов с сечениями рассеяния, отвечающими реальным законам взаимодействия излучения со средой, в небольшой модельной задаче с точечным изотропным моноэнергетическим источником, а также в защитной области реактора ВВЭР-1000. Показано, как меняются значения плотностей потоков при переходе от таблично заданных сечений к их полиномиальному представлению.

Ключевые слова: уравнение переноса, угловая зависимость сечений рассеяния.

Введение

При решении уравнения переноса методом дискретных ординат угловую зависимость групповых сечений рассеяния обычно задают полиномиальным разложением низкого порядка. Это приводит к быстрому алгоритму вычисления интеграла рассеяния.

Хорошо известно, однако, что такие разложения могут иметь низкую точность. В частности, при переходе от непрерывной энергетической зависимости сечения к групповой аппроксимации возникают групповые сечения рассеяния, отличные от нуля в небольшом интервале угла рассеяния [1], что впервые было показано в 1956 г. В. А. Чуяновым (отчет Отделения прикладной математики Математического института им. В. А. Стеклова). Такие ступенчатые (финитные) функции не могут быть аппроксимированы полиномами с достаточной точностью.

Таким образом, возникает вопрос о влиянии погрешности полиномиального разложения на точность получаемого при его использовании решения уравнения переноса — плотности потока частиц. Численные исследования показывают, что внутри протяженных гомогенных под-

областей это влияние незначительно [2], тогда как в небольших областях оно может быть велико [3]. Чтобы иметь возможность оценивать влияние полиномиальных искажений сечения на решение, необходимо иметь программно реализованные алгоритмы, позволяющие решать уравнение переноса излучения при сечениях рассеяния, заданных как полиномиально, так и таблично. Такие алгоритмы полезны также в тех задачах, где результаты, полученные методом дискретных ординат с полиномиальным представлением сечений, существенно отличаются от полученных методами Монте-Карло (опирающимися на непрерывно зависящие от энергии сечения рассеяния) или от экспериментальных данных.

Ранее были развиты программы, предназначенные для решения уравнения переноса методом дискретных ординат с таблично заданными сечениями рассеяния в одномерных геометриях [4, 5]. В настоящей работе представлен аналогичный алгоритм для многомерных геометрий (разд. 1). Алгоритм включен в программу РАДУГА-5.2 [6] и может быть выполнен как на персональных компьютерах, так и на многопроцессорных ЭВМ с разделенной памятью. По-

следнее обстоятельство очень важно, так как использование *параллельных* вычислений позволяет существенно сократить время счета по этому затратному (с точки зрения числа операций) алгоритму.

Также важно иметь программно реализованную методику получения табличных представлений групповых сечений рассеяния. Модифицированная программа NJOY [7], позволяющая получить такие представления для нейтронов и гамма-квантов на основе файлов оцененных данных в формате ENDF/B, описана в разд. 2.

В разд. 3 представлены результаты верификации алгоритма решения уравнения переноса при таблично заданных сечениях рассеяния.

В разд. 4, 5 приведены результаты исследования влияния полиномиальных интерполяций сечений рассеяния на плотности потоков нейтронов и гамма-квантов. В разд. 4 рассматривается модельная задача о точечном изотропном источнике нейтронов в однородном водяном кубе, в разд. 5 — задача о распространении нейтронов и гамма-квантов в защитной области реактора ВВЭР-1000.

1. Метод дискретных ординат с полиномиально и таблично заданными сечениями рассеяния

В правых частях многогрупповых уравнений переноса излучения находятся интегралы рассеяния, моделирующие переход частицы из группы p в группу q :

$$\widehat{S}\Psi_q = \sum_{p=1}^q \int_{\Omega} \sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \vec{\omega} \cdot \vec{\omega}') \Psi_p(\vec{r}, \vec{\omega}') d\vec{\omega}'. \quad (1)$$

Здесь функция $\Psi_q(\vec{r}, \vec{\omega})$ — плотность потока частиц из группы q в точке \vec{r} , имеющих направление $\vec{\omega}$. Сечение рассеяния $\sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \vec{\omega} \cdot \vec{\omega}')$ определяет вероятность перехода частицы при взаимодействии со средой из группы p и направления $\vec{\omega}'$ в группу q и направление $\vec{\omega}$; $\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}'$ — косинус угла рассеяния. Интегрирование в (1) выполняется по единичной сфере Ω , образованной концами единичных векторов $\vec{\omega}'$, каждый из которых задан парой углов (θ, φ) (рис. 1).

Метод дискретных ординат опирается на введение квадратуры по направлениям переноса разбиением единичной сферы Ω на M ячеек, каждой из которых отвечают узел $\vec{\omega}_m$, определяемый углами θ_m, φ_m , и вес (площадь ячейки) $\Delta\omega_m$ (рис. 2).

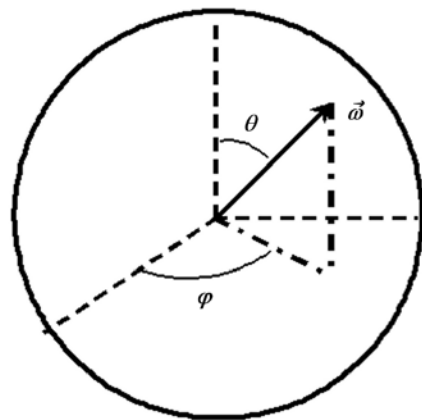


Рис. 1. Единичные векторы $\vec{\omega}$

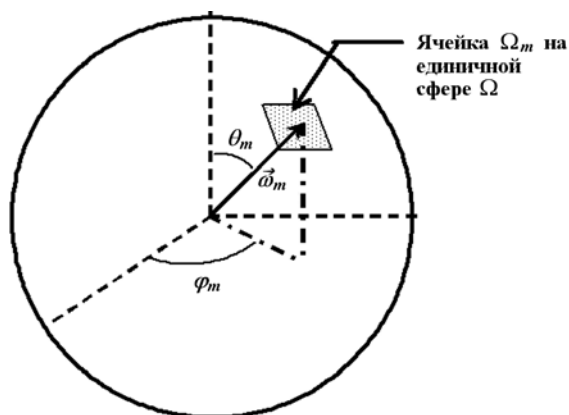


Рис. 2. Квадратура на единичной сфере

Разложение сечения рассеяния по полиномам Лежандра $P_l(\chi)$, ортогональным на отрезке $[-1, 1]$,

$$\begin{aligned} \sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \vec{\omega} \cdot \vec{\omega}') &= \\ &= \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}') \sigma_{s,p \rightarrow q,l}(\vec{r}), \quad (2) \end{aligned}$$

где

$$\sigma_{s,p \rightarrow q,l}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\chi \sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \chi) P_l(\chi) \quad (3)$$

— угловые моменты сечения, приводит к разложению интегралов рассеяния \widehat{S} по сферическим функциям $Y_{l,\nu}(\vec{\omega})$, ортогональным на единичной сфере Ω :

$$\begin{aligned} \widehat{S}\Psi_q &= \sum_{p=1}^q \sum_{l=0}^L \sum_{\nu=-l}^l Y_{l,\nu}(\vec{\omega}) \sigma_{s,p \rightarrow q,l}(\vec{r}) M_{l,\nu,p}, \\ M_{l,\nu,p} &= \int_{\Omega} Y_{l,\nu}(\vec{\omega}') \Psi_p(\vec{r}, \vec{\omega}') d\vec{\omega}'. \quad (4) \end{aligned}$$

В этом случае расчет интеграла в (1) сводится к расчету угловых моментов решения $M_{l,\nu,p}$ по следующим квадратурным формулам:

$$M_{l,\nu,p} = \sum_{m=1}^M Y_{l,\nu}(\vec{\omega}_m) \Psi_p(\vec{r}, \vec{\omega}_m) \Delta\omega_m.$$

Здесь $\Psi_p(\vec{r}, \vec{\omega}_m)$ — значения плотности потока в узлах квадратуры.

Пусть зависимость сечения рассеяния $\sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \vec{\omega} \cdot \vec{\omega}')$ от косинуса угла рассеяния $\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}'$ задается таблично. Тогда оператор \widehat{S} заменяется суммой

$$\begin{aligned} \widehat{S}\Psi_q(\vec{r}, \vec{\omega}_n) &= \\ &= \sum_{p=1}^q \sum_{m=1}^M s_{p \rightarrow q,n,m}(\vec{r}) \Psi_p(\vec{r}, \vec{\omega}_m) \Delta\omega_m. \end{aligned} \quad (5)$$

Величины $s_{p \rightarrow q,n,m}(\vec{r})$ определяются как интегралы от сечений рассеяния $\sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \vec{\omega}_n \cdot \vec{\omega}')$ по отвечающей узлу $\vec{\omega}_m$ ячейке Ω_m единичной сферы (см. рис. 2):

$$s_{p \rightarrow q,n,m}(\vec{r}) = \frac{1}{\Delta\omega_m} \int_{\Omega_m} \sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \vec{\omega}_n \cdot \vec{\omega}') d\omega'. \quad (6)$$

Они образуют матрицу рассеяния, где элемент $s_{p \rightarrow q,n,m}(\vec{r})$ отвечает переходу частицы при акте рассеяния из группы p в группу q и из направления $\vec{\omega}_m$ в направление $\vec{\omega}_n$.

Так как интегрируемая функция в (6) может быть финитной или быстро меняющейся, то для вычисления интеграла (6) вводится дополнительная сетка по ячейке Ω_m (рис. 3). Тогда

$$\begin{aligned} s_{p \rightarrow q,n,m}(\vec{r}) &= \\ &= \frac{1}{\Delta\omega_m} \sum_{k=1}^K \sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \vec{\omega}_n \cdot \vec{\omega}_{m,k}) \Delta\omega_{m,k}, \end{aligned} \quad (7)$$

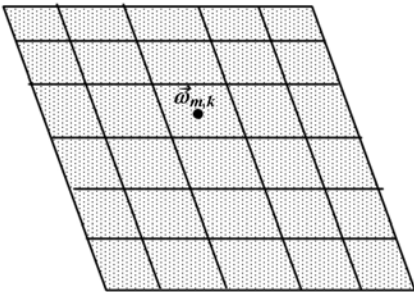


Рис. 3. Дополнительная сетка в ячейке на единичной сфере для расчета элемента матрицы рассеяния

где $\vec{\omega}_{m,k}$ и $\Delta\omega_{m,k}$ — узлы и веса дополнительной квадратуры внутри ячейки Ω_m . В качестве дополнительной используется высокоточная квадратура Гаусса.

При этом важно обеспечить выполнение соотношения баланса частиц в каждой пространственной ячейке для каждой пары энергетических групп:

$$\sum_{m=1}^M s_{p \rightarrow q,n,m}(\vec{r}) \Delta\omega_m = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\chi \sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \chi)$$

для всех значений $n = 1, \dots, M$,

что достигается введением единого для всех элементов нормировочного множителя.

Сечения рассеяния, значения которых входят в сумму (7), оптимально задавать их *средними интегральными значениями* на равномерной сетке из J ячеек, введенной на интервале $[-1, 1]$ возможного изменения косинуса угла рассеяния $\chi = \vec{\omega} \cdot \vec{\omega}'$:

$$\Sigma_{s,p \rightarrow q,j}(\vec{r}) = \frac{1}{\chi_{j+1} - \chi_j} \int_{\chi_j}^{\chi_{j+1}} d\chi \sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{r}, \chi) \quad (8)$$

при $\chi_j < \chi < \chi_{j+1}$,

$$\chi_j = -1 + \frac{2(j-1)}{J}, \quad j = 1, \dots, J+1.$$

Такой способ позволяет корректно задавать быстро осциллирующие или отличные от нуля в очень малом интервале изменения $\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}'$ сечения рассеяния (что особенно важно в задачах о переносе гамма-квантов и электронов).

Так как элементы матрицы рассеяния $s_{p \rightarrow q,n,m}(\vec{r})$ не зависят от решения, следует вычислять их до начала итерационного процесса и хранить в памяти компьютера.

Оба метода расчета интеграла столкновений реализованы в программе РАДУГА-5.2 [6]. Оценим их *трудоемкость*.

Число арифметических операций, требуемых для вычисления интеграла рассеяния в одной пространственной ячейке для одной пары энергетических групп, равно $3(L+1)^2(M+1)$ при полиномиальном P_L -задании сечений рассеяния и $2M^2$ при табличном представлении (M — число узлов угловой квадратуры). Так как в расчетах обычно используются P_5 -разложения ($L = 5$) и равномерные S_N -квadrатуры с числом узлов

$M = (N + 2) N$ для $N \geq 10$, то переход от полиномиального представления к табличному увеличивает число операций более чем в 2 раза.

При переходе к табличному представлению также увеличиваются требования к памяти. Действительно, чтобы найти интеграл (1) по формулам (4), достаточно знать только угловые моменты решения $M_{l,\nu,p}$ $((L + 1)^2$ величин в каждой пространственной ячейке в одной энергетической группе). Расчет по формулам (5) требует хранения M величин $\Psi_p(\vec{r}, \vec{\omega}_m)$. То есть переход к табличному представлению сечений увеличивает требуемый объем памяти более чем в 3 раза.

Чтобы снизить требования ко времени и памяти в расчетах с дискретно заданными сечениями рассеяния, в программе РАДУГА-5.2 реализованы алгоритмы распараллеливания вычислений. Основной расчет выполняется методом пространственной декомпозиции, когда расчетная область разбивается на подобласти и расчет

каждой подобласти выполняется на своем процессоре. Предварительно параллельным образом выполняется расчет элементов матрицы рассеяния на тех же процессорах, на которых делается основной расчет. Подробное описание алгоритмов распараллеливания и оценки их эффективности по времени и по памяти приведены в [8].

2. Модифицированные программы NJOY и TRANSX

Для подготовки групповых библиотек сечений использовались программы NJOY [7] и TRANSX [9], в которые были внесены изменения, необходимые для получения матриц микро- и макроскопических сечений межгрупповых переходов с табличным представлением угловых зависимостей. Блок-схема расчетного алгоритма приведена на рис. 4.

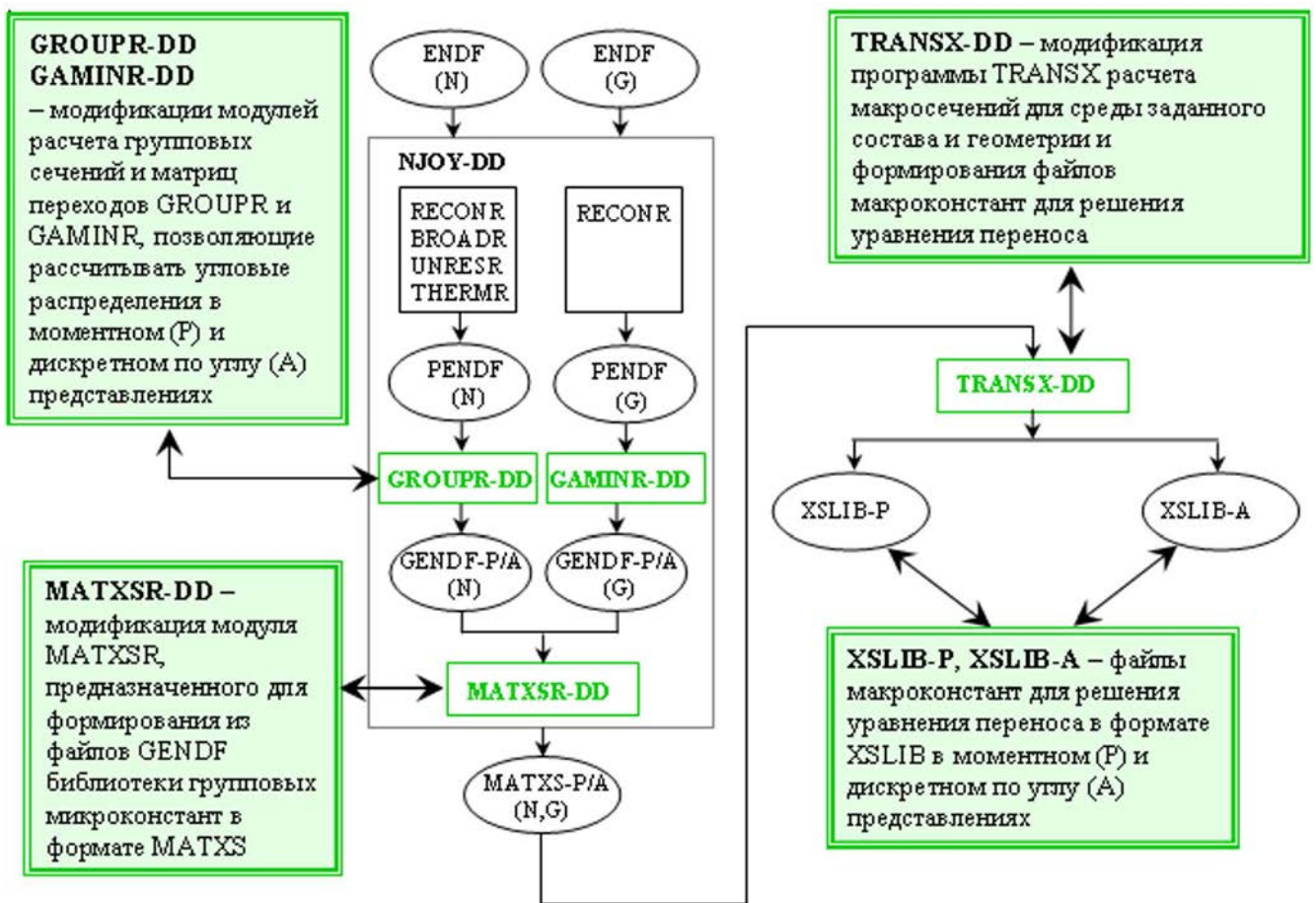


Рис. 4. Блок-схема процедуры подготовки библиотек сечений XSLIB-P и XSLIB-A

Групповые микроскопические сечения нейтронов и гамма-квантов рассчитывались с помощью программы NJOY с модифицированными модулями GROUPE-DD, GAMINR-DD в двух представлениях — моментном (P_7) и табличном (A_{100}), соответствующих формулам (2) и (8) с параметрами $L = 7$ и $J = 100$ соответственно. Исходные оцененные данные по сечениям брались из библиотеки ENDF/B-VII.0 [10]. В качестве энергетической сетки использовалась групповая структура библиотеки BUGLE-96 с числом групп 47 и 20 для нейтронов и гамма-квантов соответственно. Весовой функцией служил стандартный спектр EPRI-CELL (параметр IWT=5, см. [7]).

Полученные для каждого материала групповые микроскопические сечения объединялись модифицированным модулем MATXS-DD в файлы MATXS с образованием библиотек MATXS-P и MATXS-A. Макроскопические сечения готовились по модифицированной программе TRANSX-DD в формате XSLIB.

Примеры сечений рассеяния нейтронов и гамма-квантов в воде для моментного P_7 - (параметр $L = 7$ в (2)) и табличного A_{100} - (параметр $J = 100$ в (8)) представлений приведены соответственно на рис. 5 и 6. Можно видеть, что ошибки полиномиальных аппроксимаций могут быть значительными, особенно для сечений рас-

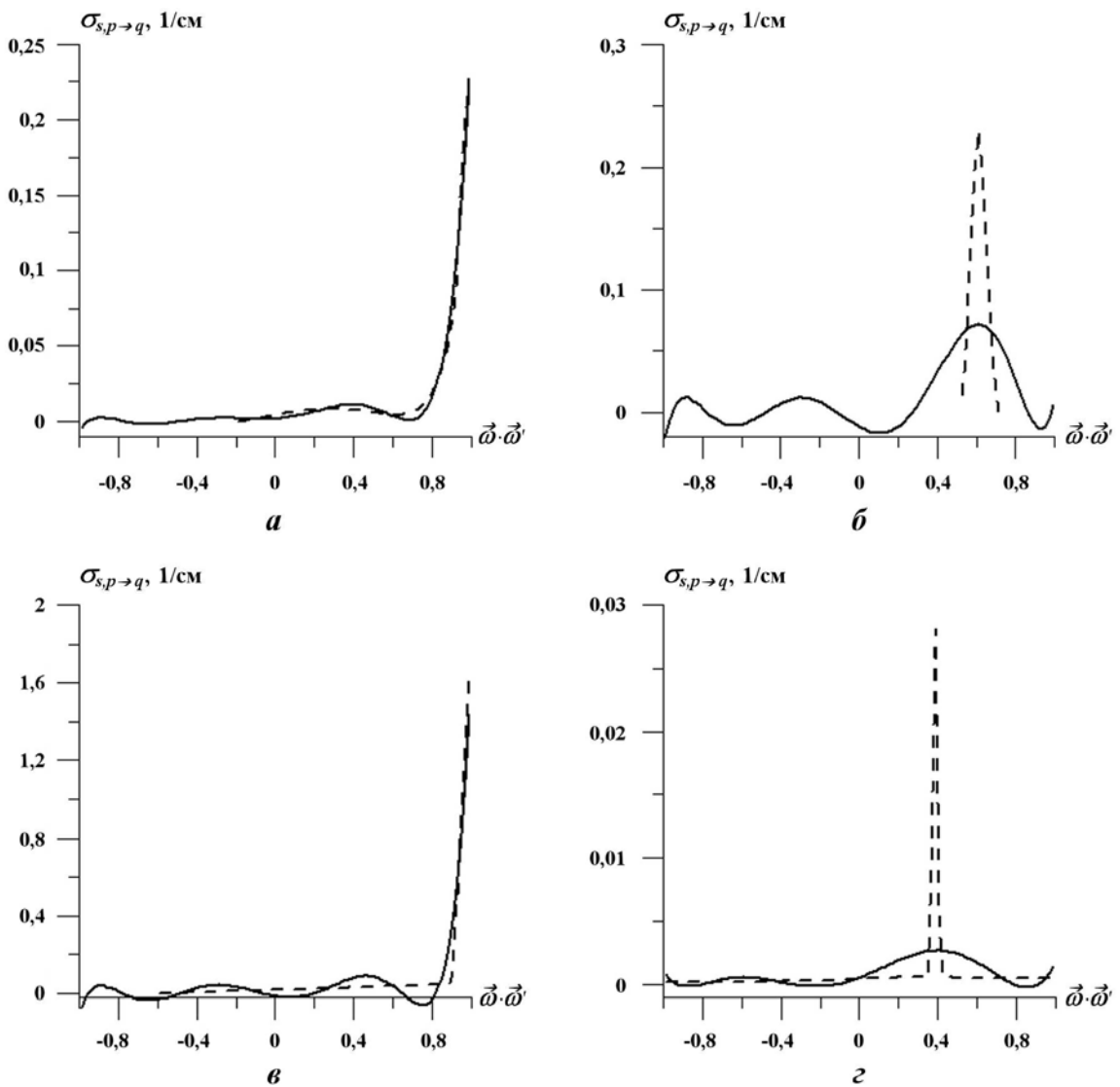


Рис. 5. Сечения рассеяния $\sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}')$ нейтронов в воде: a — 13,2 МэВ \rightarrow 13,2 МэВ; $б$ — 1,18 МэВ \rightarrow 0,43 МэВ; $в$ — 0,029 МэВ \rightarrow 0,029 МэВ; $г$ — 13,2 МэВ \rightarrow 2,08 МэВ; — — P_7 -представление; - - - - A_{100} -представление

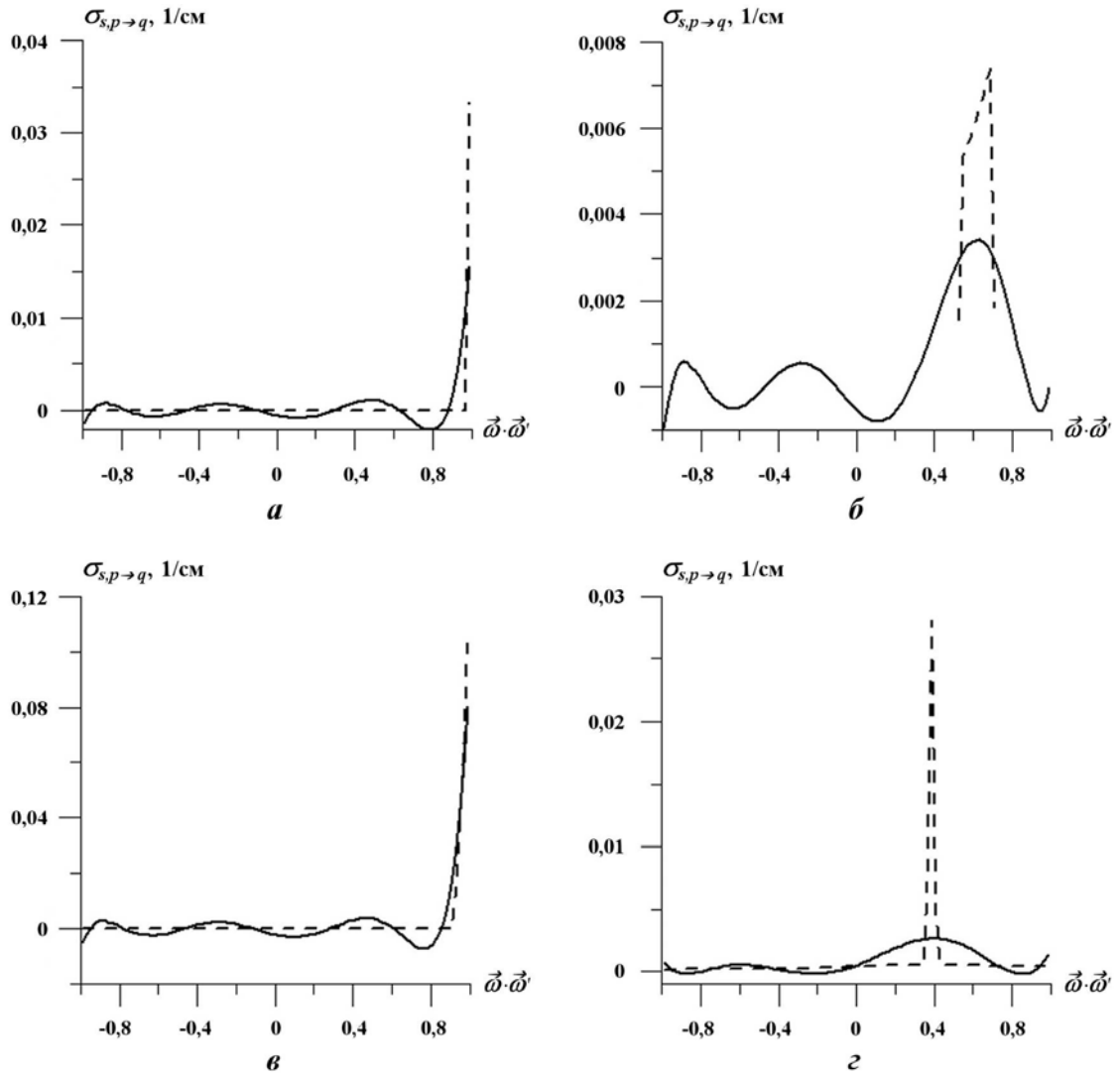


Рис. 6. Сечения рассеяния $\sigma_{s,p \rightarrow q}(\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}')$ гамма-квантов в воде: *a* — 18,5 МэВ \rightarrow 18,5 МэВ; *б* — 18,5 МэВ \rightarrow 3 МэВ; *в* — 5 МэВ \rightarrow 5 МэВ; *г* — 3 МэВ \rightarrow 1,5 МэВ; — — P_7 -представление; - - - A_{100} -представление

сеяния, отличных от нуля в узкой подобласти изменения $\vec{\omega} \cdot \vec{\omega}'$.

3. Верификация алгоритма решения уравнения переноса с таблично заданными сечениями рассеяния

Для верификации описанного в разд. 1 алгоритма решения уравнения переноса с таблично заданными сечениями рассеяния рассмотрим модельную задачу 1 об однородном кубе, в котором процессы рассеяния моделируются функцией Хеньи—Гринштейна

$$\sigma_{s,1 \rightarrow 1}(\vec{r}, \chi) = \frac{1}{2} (1 - g^2) (1 + g^2 - 2g\chi)^{-3/2}, \quad (9)$$

где параметр g определяет средний косинус угла рассеяния частицы. Моменты (3) такого сечения рассеяния определяются равенствами $\sigma_{s,1 \rightarrow 1,l}(\vec{r}) = g^l$.

Поскольку сечение рассеяния Хеньи—Гринштейна является гладкой нефинитной функцией косинуса угла рассеяния χ , то с увеличением порядка L полиномиальные разложения сходятся к точному сечению рассеяния.

Графики сечения рассеяния Хеньи—Гринштейна и соответствующих ему P_L -разложений при $g = 0,85$ (такое значение отвечает, например, процессам рассеяния оптического излучения в облаках) для $L = 21$ и $L = 43$ приведены на рис. 7. Отметим, что для значения $L = 21$ осцилляции P_L -разложения очень велики; из-за этих осцилляций P_{21} -аппроксимация явля-

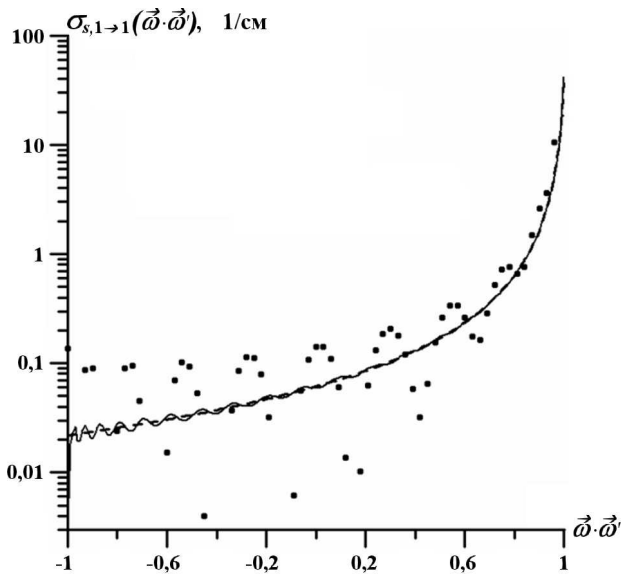


Рис. 7. Сечения рассеяния Хеньи—Гринштейна: --- — точное; — — P_{43} -разложение; • — P_{21} -разложение

ется знакопеременной (на рис. 7 отмечены только положительные значения P_{21} -разложения).

Выберем остальные параметры задачи следующим образом:

- число энергетических групп — 1;
- вероятность выживания кванта — 0,95;
- длина ребра однородного куба — 5 пробегов;
- угловая квадратура S_{36} , содержащая 1368 узлов на единичной сфере Ω .

Плотности потока $\bar{\Psi}(\theta)$ отраженных частиц в центре нижней грани куба \vec{r}_0 (рис. 8), суммарные по углу φ в зависимости от косинуса угла θ между направлением движения частицы и осью z для A_{6000} - и P_L -представлений сечения рассеяния (9) приведены на рис. 9. Величины ε_L — максимальные по θ значения отклонений функций $\bar{\Psi}(\theta)$, полученных в P_L -представлении, от функций $\bar{\Psi}(\theta)$, найденных в A_{6000} -представлении, приведены в табл. 1. Из табл. 1 и рис. 9 следует, что при увеличении порядка разложения L плотности потоков, полу-

Таблица 1

Максимальные отклонения ε_L в задаче 1

L	$\varepsilon_L, \%$
11	235
21	42
31	17
43	2

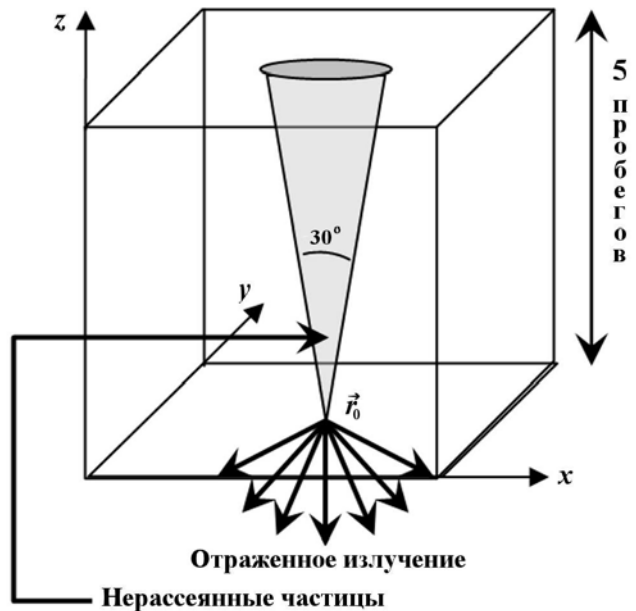


Рис. 8. Область расчета задачи 1

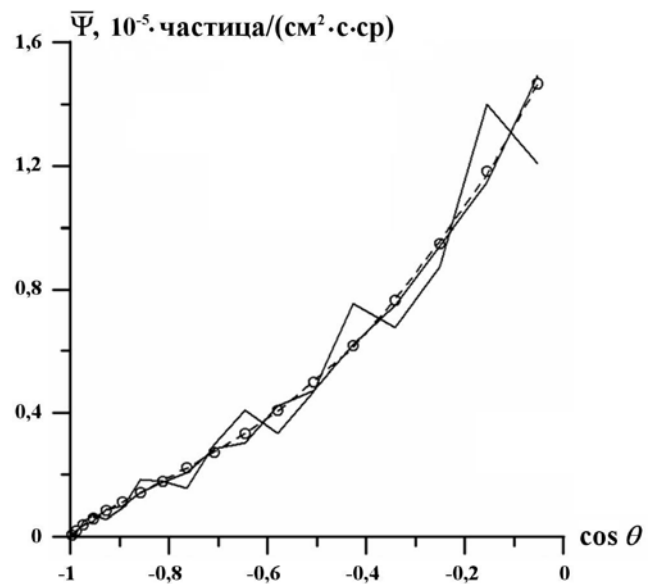


Рис. 9. Плотности потока $\bar{\Psi}$ отраженных частиц в задаче 1: o — A_{6000} -представление; — — P_{21} -разложение; — — — P_{31} -разложение; - - - — P_{43} -разложение (θ — угол между направлением движения частицы и осью z)

ченные в P_L -представлении сечений рассеяния, сходятся к плотности потока, найденной в A_{6000} -представлении.

4. Задача о водяном кубе

Рассмотрим модельную задачу 2 с сечениями рассеяния, отвечающими взаимодействию ней-

тронов с реальными материалами. Это задача об однородном, наполненном водой кубе с ребром длиной 5 см, на нижней грани которого расположен точечный изотропный моноэнергетический (14,5 МэВ) источник нейтронов (рис. 10).

Выберем регулярную пространственную сетку с шагом 0,5 см и найдем энергетические распределения скалярных (суммарных по направлениям) плотностей потоков нейтронов Φ в трех пространственных точках — A , B и C (см. рис. 10) для моментного P_7 - ($L = 7$ в (2)) и табличного A_{100} - ($J = 100$ в (8)) представлений сечений рассеяния (см. рис. 5).

Исключим все факторы, которые могут повлиять на решение уравнения переноса, кроме сечений рассеяния. В частности, в расчетах будем использовать линейную St-схему, параметры которой не зависят от решения. То есть в обоих случаях для аппроксимации уравнения переноса будем пользоваться идентичными сеточными уравнениями. Также будем использовать полностью согласованные между собой константы (моменты P_7 -сечений в точности равны угловым моментам A_{100} -сечений).

Далее, для того чтобы избежать влияния угловой квадратуры на решение, проведем расчеты с двумя угловыми квадратурами с равномерно распределенными на единичной сфере узлами (соответствующее число узлов для каждой квадратуры указано в табл. 2).

Полученные скалярные потоки Φ для всех энергий приведены на рис. 11. Здесь в верхней энергетической группе (к которой принадлежат испускаемые источником нейтроны) предельные

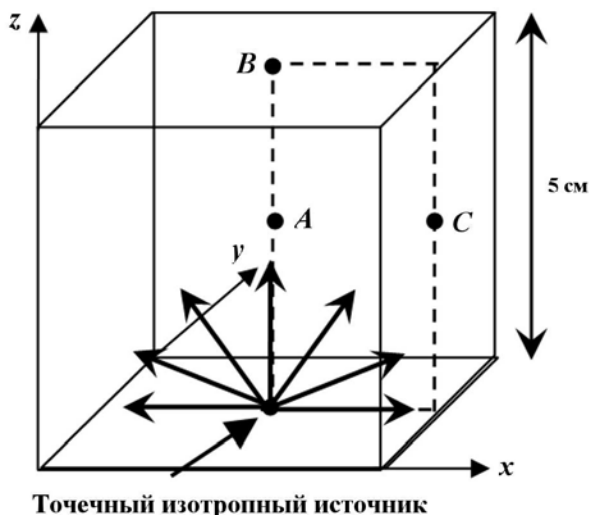


Рис. 10. Схема области расчета модельной задачи 2

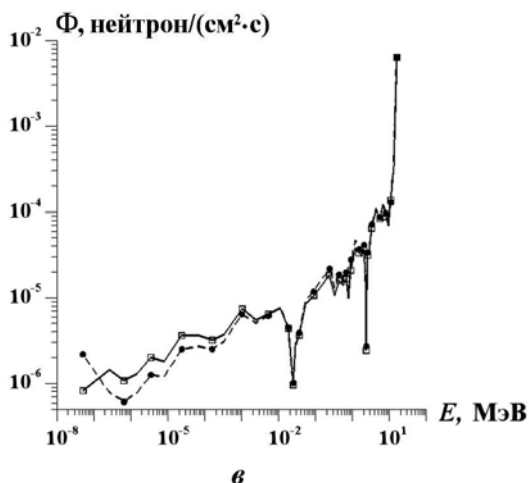
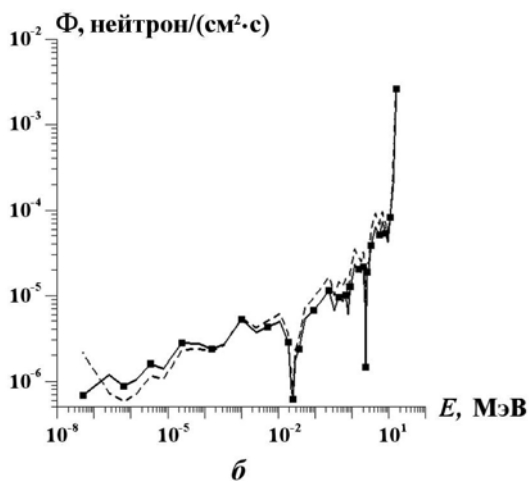
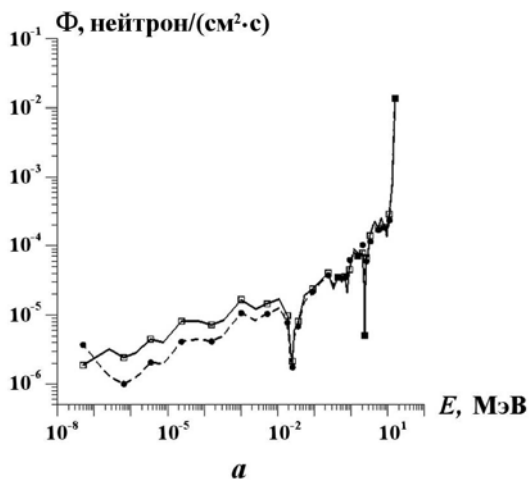


Рис. 11. Скалярные потоки Φ в задаче 2: a — в точке A ; $б$ — в точке B ; $в$ — в точке C ; \bullet — A_{100} -представление, квадратура S_{16} ; $- - -$ — A_{100} -представление, квадратура S_{24} ; \square — P_7 -представление, квадратура S_{16} ; $—$ — P_7 -представление, квадратура S_{24}

Таблица 2

Число узлов угловых квадратур Карлсона на сфере в задаче 2

Квадратура	Число узлов M
S_{16}	288
S_{24}	624

функции различаются менее чем на 1%, тогда как для нижних групп отклонение значительно — в центре куба (точка A) оно достигает 99%, в центре верхней грани куба (точка B) — 208%, в центре боковой грани куба (точка C) — 169%. Можно утверждать, что отклонения в предельных функциях являются следствием больших отклонений в сечениях переходов нейтронов (см. рис. 5), описывающих замедление нейтронов при взаимодействии с водой.

5. Задача расчета защитной области реактора ВВЭР-1000

Рассмотрим упрощенную модель защитной области реактора ВВЭР-1000, в которой он представлен как сильно гомогенизированный осесимметричный цилиндр высотой 572,42 см и радиусом 365,51 см.

Источник нейтронов — активная зона, прилегающая к оси цилиндра, занимает 11,6% области расчета (рис. 12). Защитная область представлена 28 различными материалами (вода, воздух, сталь, железо, бетон, железобетон различных типов).

Как и в предыдущем разделе, в расчетах используются полностью согласованные между собой константы (моменты P_7 -сечений в точности равны угловым моментам A_{100} -сечений), линейная St -схема и серия сгущающихся квадратур с равномерно распределенными на единичной полусфере узлами (табл. 3).

Таблица 3

Число узлов угловых квадратур Карлсона на полусфере

Квадратура	Число узлов M
S_{10}	60
S_{16}	144
S_{24}	312
S_{36}	684
S_{48}	1 200

Максимальные Δ_{\max} и средние Δ_{mean} по области расчета отклонения плотностей суммарных по энергии и углам потоков, полученных в P_7 -представлении, от таких же функций, рассчитанных в A_{100} -представлении, приведены в табл. 4. Максимальные $\Delta_{\max}^{\text{корпус}}$ и средние $\Delta_{\text{mean}}^{\text{корпус}}$ по объему корпуса отклонения для плотностей доз приведены в табл. 5. Данные показывают, что при сгущении угловой квадратуры плот-

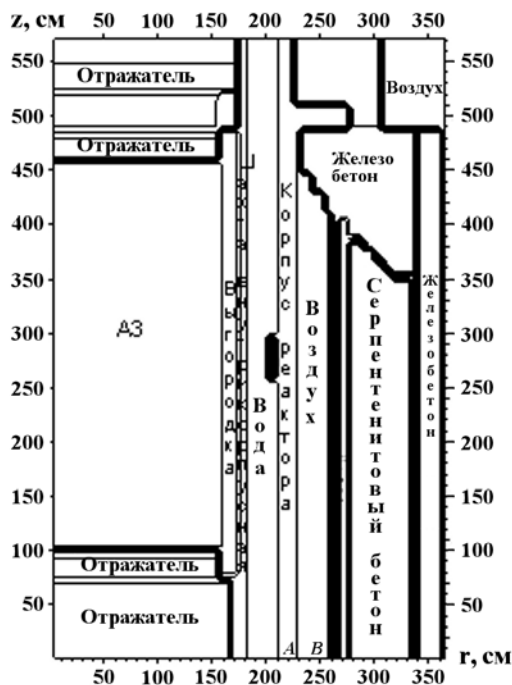


Рис. 12. Область расчета ВВЭР-1000

Таблица 4

Отклонения Δ_{\max} и Δ_{mean}

Квадратура	$\Delta_{\max}, \%$		$\Delta_{\text{mean}}, \%$	
	Нейтроны	Гамма-кванты	Нейтроны	Гамма-кванты
S_{10}	7,77	5,43	2,82	1,9
S_{16}	2,24	1,9	0,57	0,54
S_{24}	1,61	1,09	0,603	0,37
S_{36}	0,62	0,42	0,177	0,132

Таблица 5

Отклонения $\Delta_{\max}^{\text{корпус}}$ и $\Delta_{\text{mean}}^{\text{корпус}}$

Квадратура	$\Delta_{\max}^{\text{корпус}}, \%$	$\Delta_{\text{mean}}^{\text{корпус}}, \%$
S_{10}	5,42	0,46
S_{16}	1,6	0,084
S_{24}	1,27	0,09
S_{36}	0,49	0,033

ности суммарных по энергии и углам потоков во всей области и доз на корпусе, полученные для P_7 - и A_{100} -представлений сечений рассеяния, сходятся к одним и тем же функциям.

На рис. 13, 14 приведены максимальные $\delta_{\max}(E)$ и средние $\delta_{\text{mean}}(E)$ по области значения отклонений плотностей скалярных (суммарных по углам) потоков, полученных в P_7 -

представлении, от аналогичных функций, найденных в A_{100} -представлении. Можно видеть, что плотности скалярных потоков, полученные в P_7 - и A_{100} -представлениях, при сгущении угловой квадратуры сходятся к одной функции почти для всех энергетических групп.

Сходимость к различным значениям имеет место только в отдельных, расположенных на пери-

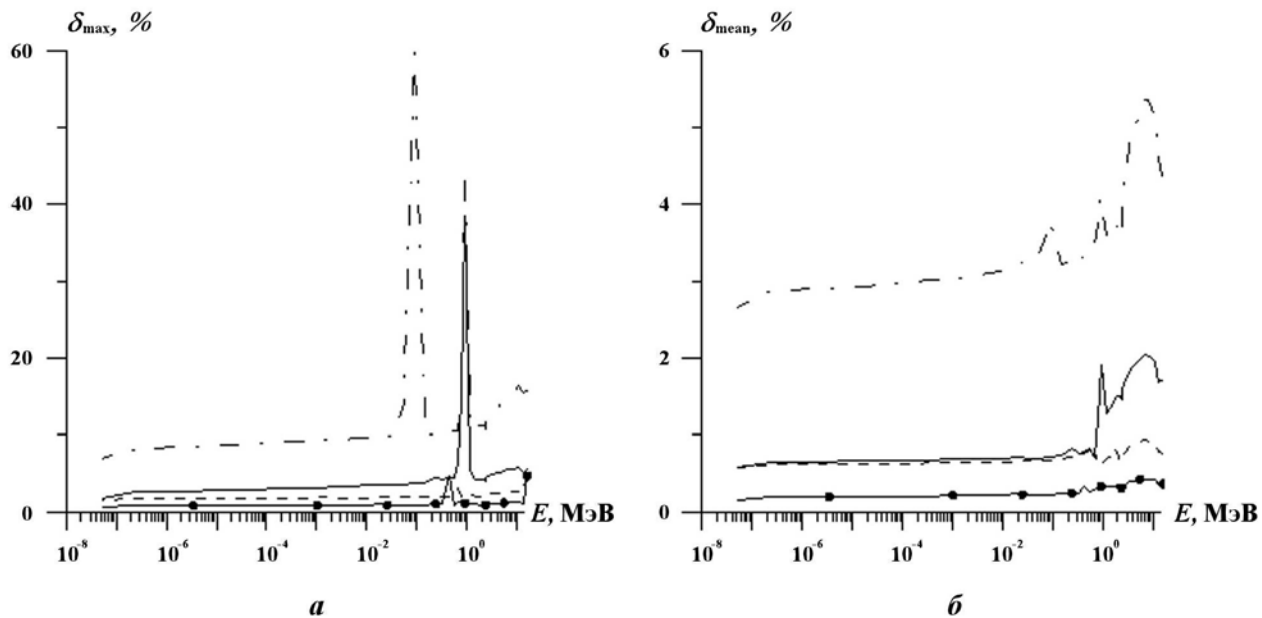


Рис. 13. Отклонения $\delta_{\max}(a)$ и $\delta_{\text{mean}}(b)$: — · — — квадратура S_{10} ; - - - — квадратура S_{24} ; — — — квадратура S_{16} ; —●— — квадратура S_{36}

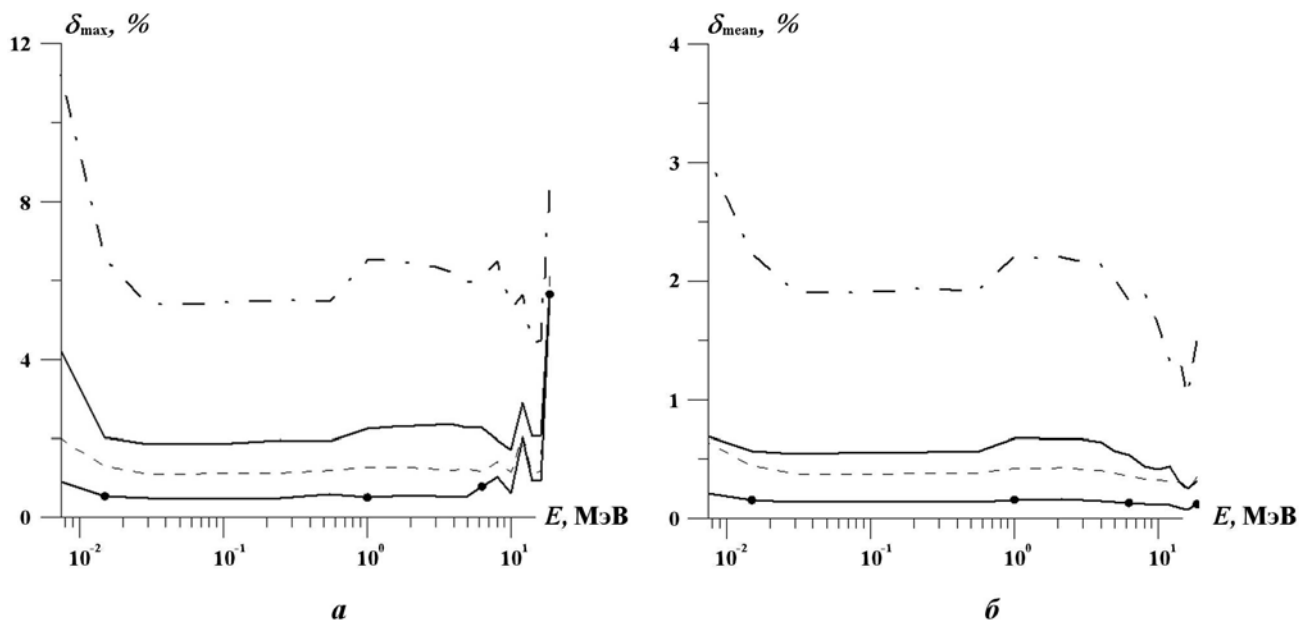


Рис. 14. Отклонения $\delta_{\max}(a)$ и $\delta_{\text{mean}}(b)$: — · — — квадратура S_{10} ; - - - — квадратура S_{24} ; — — — квадратура S_{16} ; —●— — квадратура S_{36}

ферии области расчета, пространственных ячеек для частиц больших энергий. Предельные при сгущении угловых квадратур плотности потоков нейтронов и гамма-квантов $\bar{\Psi}_q$, суммарные по азимуту φ в зависимости от косинуса полярного угла θ , в некоторых из этих пространственных ячеек (точки A и B на рис. 12) для больших энергий приведены на рис. 15, 16. На этих же рисунках даны отклонения плотностей потоков (в %) для некоторых значений $\cos \theta$. Графики на рис. 17 демонстрируют сходимость $\bar{\Psi}_q$ для каж-

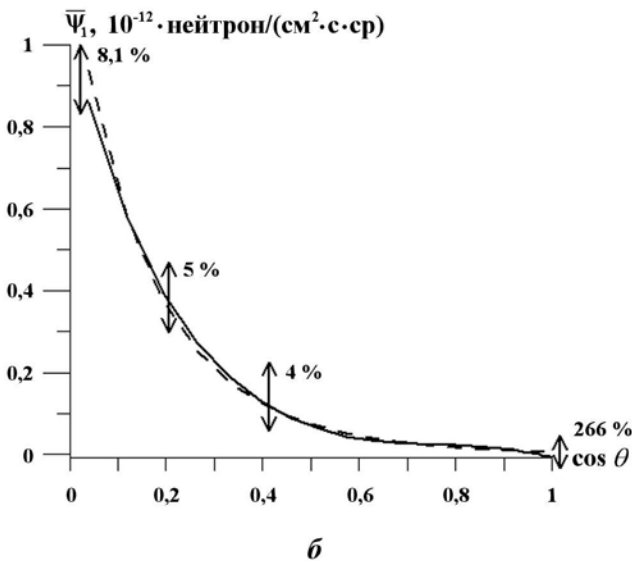
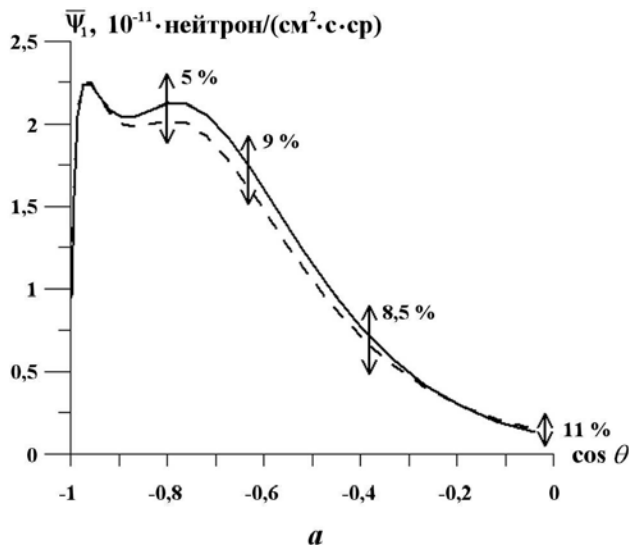


Рис. 15. Плотности потоков нейтронов $\bar{\Psi}_1$ в точке A ($r = 226,3$, $z = 1,467$, внешняя граница корпуса реактора) для энергии 15,8 МэВ (группа 1), квадратура S_{48} : $a - -1 \leq \cos \theta \leq 0$; $b - 0 \leq \cos \theta \leq 1$; - - - - A_{100} -представление; — — P_7 -представление

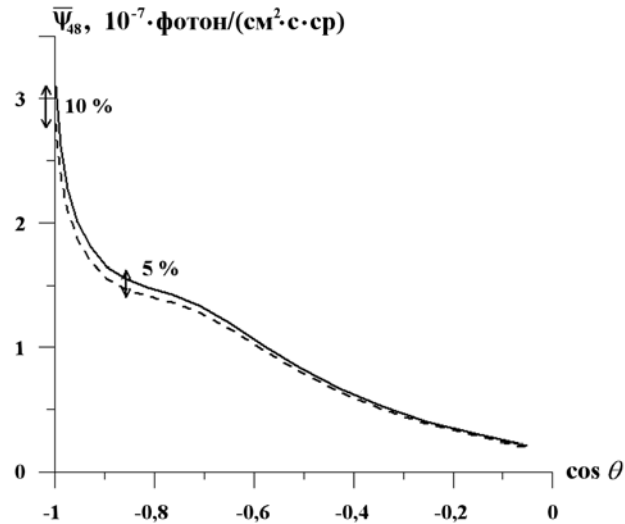


Рис. 16. Плотности потоков гамма-квантов $\bar{\Psi}_{48}$ в точке B ($r = 258,1$, $z = 1,467$, воздух) для энергии 18,5 МэВ (группа 48), квадратура S_{36} : - - - - A_{100} -представление; — — P_7 -представление

дого представления сечений рассеяния в точке A при сгущении квадратур.

Заключение

Представлены модифицированная программа NJOY для получения табличного представления сечений рассеяния на основе файлов оцененных данных формата ENDF/B и алгоритм решения уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов методом дискретных ординат с таблично заданными сечениями рассеяния (программа РАДУГА-5.2(П)). Этот алгоритм, являющийся более затратным с точки зрения числа арифметических операций и памяти, чем аналогичный алгоритм, опирающийся на полиномиальные аппроксимации сечений рассеяния, использует распараллеливание вычислений, которое существенно сокращает время счета. Верификация алгоритма выполнена на модельной задаче об однородном кубе, в котором рассеяние моделируется с помощью функции Хеньи—Гринштейна.

Расчет по этим программам выполнен для двух согласованных наборов сечений рассеяния — P_7 (сечения представлены разложением 7-го порядка) и A_{100} (сечения заданы своими средними значениями в 100 интервалах равномерной сетки) в двух задачах:

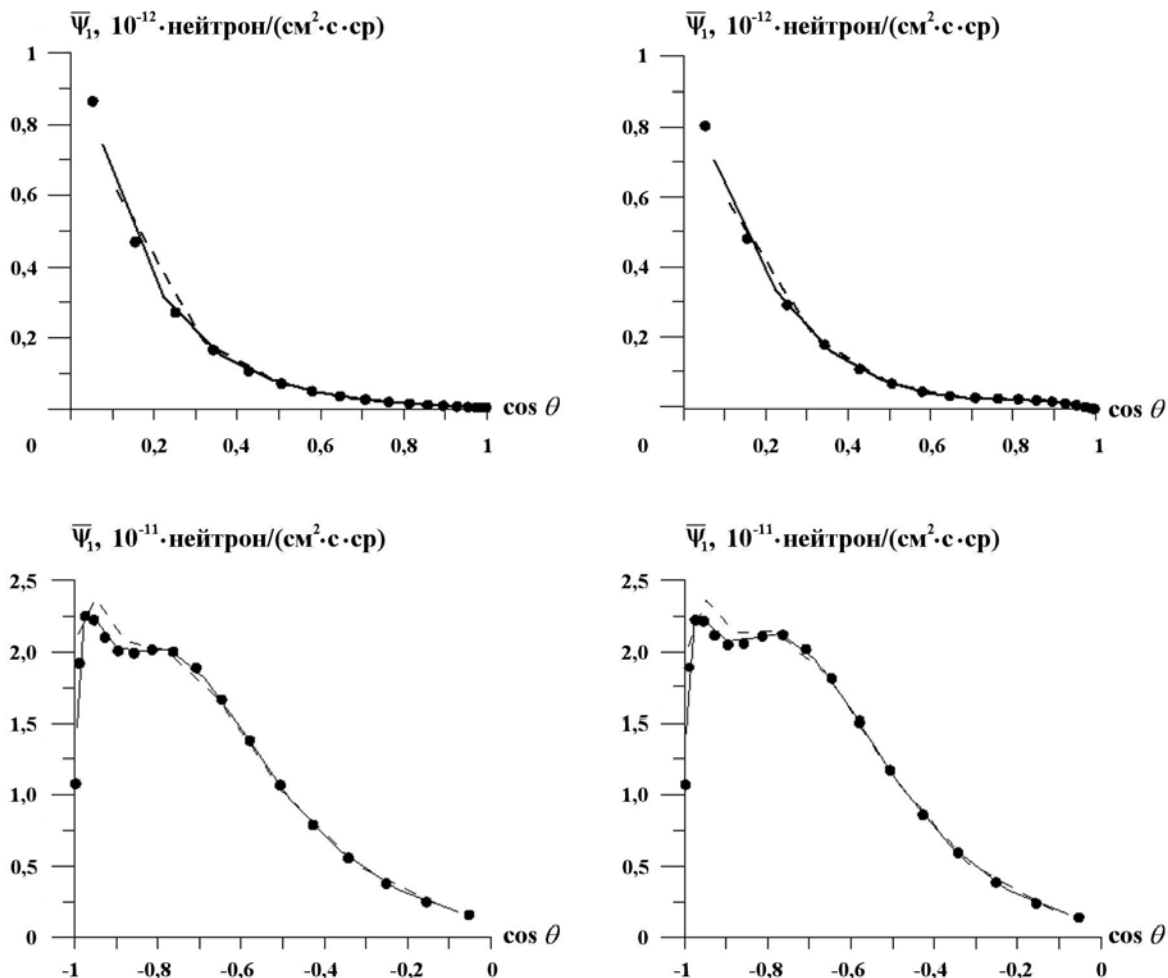


Рис. 17. Плотности потоков нейтронов $\bar{\Psi}_1$ в точке A ($r = 226,3$, $z = 1,467$, внешняя граница корпуса) для энергии 15,8 МэВ (группа 1) на сгущающихся квадратурах: слева — A_{100} -представление; справа — P_7 -представление; - - - - квадратура S_{16} ; — — — квадратура S_{24} ; • — квадратуры S_{36} и S_{48}

- в водяном кубе с точечным изотропным моноэнергетическим источником нейтронов,
- в защитной области реактора ВВЭР-1000 в упрощенной математической модели с представлением реактора в виде осесимметричного цилиндра (двумерная (r, z) -геометрия).

Найдены предельные (при сгущении угловых квадратур) решения для двух наборов сечений и St -линейной (не зависящей от искомого решения) сеточной аппроксимации по пространственным переменным.

Полученные результаты показывают, что в защитной области реактора, где источник занимает существенную часть области расчета и излучает нейтроны во всем рассматриваемом энергетическом интервале, угловые распределения

плотностей потоков, полученные в P_7 - и A_{100} -представлениях, только в некоторых пространственных точках для нейтронов и гамма-квантов высоких энергий могут быть существенно различными. Однако в соответствующих скалярных (суммарных по углам) плотностях потоков это различие уменьшается, а суммарные (по энергиям и углам) P_7 - и A_{100} -плотности потоков становятся одинаковыми. Причиной этого является компенсация отклонений при суммировании потоков по углам и энергии. Также важно отметить, что пространственные ячейки с различными угловыми распределениями P_7 - и A_{100} -потоков занимают приблизительно 3% области расчета и расположены на периферии защитной области реактора. По мнению авторов, доля 3% для такого опасного объекта, как ЯТУ, не может считаться пренебрежимой.

Значительно большие отклонения P_7 - и A_{100} -решений (более 200 %) в энергетических распределениях плотностей потоков нейтронов получены в задаче с точечным моноэнергетическим источником в водяном кубе. Эти отклонения возникают за счет больших различий в P_7 - и A_{100} -сечениях перехода, описывающих замедление нейтронов при взаимодействии со средой.

Таким образом, можно заключить, что отклонения в P_7 - и A_{100} -решениях уменьшаются с увеличением пространственного объема и энергетического диапазона источника, с приближением рассматриваемой пространственной точки к источнику и с увеличением степени усреднения решения (по углам или по углам и энергиям). В настоящее время без проведения исследования для каждой конкретной задачи нельзя априори сделать вывод о значительности или незначительности влияния полиномиальных искажений сечения рассеяния на решение уравнения переноса.

Отметим также, что рассматриваемая в этом тестировании линейная St-схема не используется в реальных расчетах из-за своей низкой точности. Широко распространенные нелинейные схемы, весовые параметры которых зависят от решения, приводят к большим отклонениям в P_7 - и A_{100} -решениях.

Список литературы

1. Дубинин А. А. Вторичное гамма излучение в радиационной защите. Энергоатомиздат, 1984.
2. Brockmann H. Treatment of Anisotropic scattering in numerical neutron transport theory // Nucl. Sci. and Eng. 1981. Vol. 77. P. 377—414.
3. Yamamoto J., Takahashi A., Ebisuya M., Sumita K. Measurements and calculations of angular flux spectra emitted from lithium and graphite slabs with D-T neutron source // J. Nucl. Sci. and Tech. 1980. Vol. 17. P. 255—268.

4. Yamamoto J., Takahashi A., Sakakihara Y., Saito N., Sumita K. Neutron transport calculations by using double-differential cross sections // Ibid. 1982. Vol. 19. P. 276—288.
5. Волощенко А. М., Дубинин А. А. РОЗ-6.3 — программа для решения уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов в одномерных геометриях методом дискретных ординат // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов. 1984. Вып. 6(43). С. 30—39.
6. Nikolaeva O. V., Bass L. P., Germogenova T. A., Kuznetsov V. S. Algorithms to calculation of radiative fields from localized sources via the code Raduga-5.1(P) // Transp. Theory & Statist. Phys. 2007. Vol. 36. P. 439—474.
7. NJOY99.0: Code system for producing pointwise and multigroup neutron and photon cross sections from ENDF/B data // LANL. PSR-480. 2000. <http://www.rist.or.jp/rsicc/app/NJOY99.0.htm>
8. Николаева О. В., Басс Л. П., Кузнецов В. С. Методы распараллеливания на многопроцессорных системах с распределенной памятью алгоритмов решения уравнения переноса излучения в программе РАДУГА // Вычислительные методы и программирование. 2009. Т. 10. С. 116—122.
9. MacFarlane R. E. TRANSX-2: A code for interfacing MATXS cross-section libraries to nuclear transport codes. LA-12312-MS. 1992. t2.lanl.gov/publications/transx/transx.ps
10. Chadwick M. B., Oblozinsky P., Herman M. et al. ENDF/B-VII.0: Next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology // Nuclear Data Sheets. 2006. Vol. 107. No. 12. P. 2931—3060.

Статья поступила в редакцию 21.09.09.

УДК 519.6

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ РАСТВОРОВ ПОД УПРАВЛЯЮЩИМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ НА ПРИМЕРЕ ВЫРАЩИВАНИЯ БИОКРИСТАЛЛОВ

В. П. Гинкин, С. М. Ганина, О. М. Гинкина
(ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск)

Построена математическая модель и выполнены численные исследования процесса кристаллизации белка (лизоцима) из водного раствора под воздействием пространственного распределения концентрации осадителя (NaCl) и управляющим точечным воздействием температуры. Математическая модель описывает образование зародышей кристаллов и их рост в зависимости от локального значения пересыщения, а также тепломассоперенос во всей области раствора, включая кристаллы белка. Тепломассоперенос описывается уравнениями Навье—Стокса в приближении Буссинеска с учетом термогравитационной и концентрационной конвекций.

Ключевые слова: кристаллизация белка, лизоцим, математическая модель кристаллизации, осадитель, равновесная растворимость, зависимость растворимости от температуры, пересыщение, конвекция, уравнения Навье—Стокса, алгоритм расчета, управление скоростью роста, точечное температурное воздействие.

Обозначения

C_1, C_2 — концентрации лизоцима и осадителя (NaCl) соответственно;
 $C_{1(0)}, C_{2(0)}$ — начальные концентрации лизоцима и осадителя;
 D_1, D_2 — коэффициенты диффузии лизоцима и осадителя;
 \vec{V} — вектор скорости течения раствора;
 p — давление;
 h — удельная энтальпия;
 T, T_0 — температура и ее начальное значение;
 β_T — коэффициент теплового расширения раствора;
 β_1, β_2 — коэффициенты концентрационного расширения белка и осадителя соответственно;
 \vec{g} — вектор остаточной гравитации;
 $\rho = \rho_{\text{H}_2\text{O}}(1 + \beta_1 C_1 + \beta_2 C_2)$ — плотность раствора;
 ρ_c — плотность кристалла;
 ν — кинематическая вязкость;
 K_{p1}, K_{p2} — равновесные коэффициенты распределения белка и осадителя соответственно;
 V_L, V_S — объемы жидкой и твердой фаз в ячейке сетки;
 $V_{\text{cell}} = V_L + V_S$ — объем ячейки сетки;
 $\varepsilon_L = V_L/V_{\text{cell}}, \varepsilon_S = V_S/V_{\text{cell}}$ — доли жидкой и твердой фаз в ячейке сетки;
 S — растворимость лизоцима;
 $\sigma = C_1/S$ — пересыщение;
 η — предельное пересыщение;
 c_p — теплоемкость;
 k — коэффициент теплопроводности.

Введение

В работе [1] предложен метод контролируемого роста биокристаллов, основанный на точечном воздействии температуры на капилляр, заполненный раствором протеина. Схема эксперимента следующая.

Тонкостенный капилляр внутренним диаметром 1 мм с раствором лизоцима помещен в термостат с постоянной в течение всего времени эксперимента температурой $T_0 = 32^\circ\text{C}$. Начальная концентрация лизоцима в растворе $C_{1(0)} = 50$ мг/мл. Начальная концентрация осадителя NaCl в растворе $C_{2(0)} = 4\%$ массовых, т. е. $C_{2(0)} = 0,04\rho$, где ρ — плотность раствора. В начальный момент времени в центральной части капилляра на участке стенки длиной 0,05 см путем подвода к стенке капилляра тонкой иглы, охлажденной до температуры 6°C , создается область с пониженной температурой $T_1 = 6^\circ\text{C}$. В результате того, что растворимость лизоцима в области раствора вблизи контакта холодной иглы со стенкой капилляра понижается, в данной области возникает зародыш кристалла.

В этот момент для того, чтобы уменьшить скорость роста кристалла, температуру проводника тепла увеличивают до значения $T_2 = 12^\circ\text{C}$ и далее не меняют в течение всего эксперимента (приблизительно 6 суток).

Для исследования процесса зарождения и роста кристаллов белка под управляющим воздействием температуры была разработана математическая модель [2] и написана программа расчета, реализующая данную модель в двумерном приближении в декартовых координатах. В этой модели емкость с раствором рассматривается как замкнутая прямоугольная область высотой 1 мм и шириной 6 мм.

Математическая модель

В области *кристалл—раствор* решаются уравнения конвективного теплопереноса в приближении Буссинеска:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \vec{V} - \beta_1 \vec{g} (C_1 - C_{1(0)}) - \beta_2 \vec{g} (C_2 - C_{2(0)}) - \beta_T \vec{g} (T - T_0); \quad (1)$$

$$\text{div} \vec{V} = 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \nabla T = \frac{1}{c_p \rho} \nabla \lambda \nabla T; \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \vec{V} \nabla C_1 = \nabla D_1 \nabla C_1 + S_1; \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} + \vec{V} \nabla C_2 = \nabla D_2 \nabla C_2 + S_2, \quad (5)$$

где S_1, S_2 — стоки концентраций примесей в кристалл при его росте (либо источники концентраций примесей при его растворении):

$$S_1 = \frac{\partial \varepsilon_S}{\partial t} (1 - K_{p1}) C_1 + \varepsilon_S \frac{\partial C_1}{\partial t}; \quad (6)$$

$$S_2 = \frac{\partial \varepsilon_S}{\partial t} (1 - K_{p1}) C_2 + \varepsilon_S \frac{\partial C_2}{\partial t}. \quad (7)$$

Производная от доли твердой фазы по времени $\frac{\partial \varepsilon_S}{\partial t}$ в выражениях (6), (7) означает скорость движения границы фазового перехода. Если она положительна, то кристалл растет, если отрицательна — кристалл растворяется.

Подставив (6), (7) в (4), (5) и сделав несложные преобразования, получим вместо (4), (5) следующие уравнения:

$$\varepsilon_L \frac{\partial C_1}{\partial t} + \vec{V} \nabla C_1 = \nabla D_1 \nabla C_1 + \frac{\partial \varepsilon_S}{\partial t} (1 - K_{p1}) C_1; \quad (8)$$

$$\varepsilon_L \frac{\partial C_2}{\partial t} + \vec{V} \nabla C_2 = \nabla D_2 \nabla C_2 + \frac{\partial \varepsilon_S}{\partial t} (1 - K_{p2}) C_2. \quad (9)$$

На фиксированной сетке значения C_1 и C_2 в ее узлах являются усредненными по объему ячейки сетки концентрациями лизоцима и осадителя соответственно. Коэффициент K_p равен отношению истинных концентраций примеси в твердой и жидкой фазах на границе фазового перехода. Для осадителя NaCl $K_{p2} = 0,01$. Для лизоцима $K_{p1} = \rho_c \varepsilon_L / C_1$. Подставив это выражение в уравнение (8) и произведя несложные преобразования, получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial(\varepsilon_L C_1)}{\partial t} + \vec{V} \nabla C_1 = \nabla D_1 \nabla C_1 - \frac{\partial \varepsilon_S}{\partial t} \rho_c \varepsilon_L. \quad (10)$$

Полученное уравнение эквивалентно (8), но удобней для решения, так как не содержит неизвестного заранее значения K_{p1} .

Система пяти уравнений (1)–(3), (9), (10) содержит шесть неизвестных: \vec{V} , p , T , C_1 , C_2 , ε_L . Для замыкания уравнений (1)–(3), (9), (10) необходимо сформулировать условие для вычисления ε_L . Это условие получается из требования равенства концентрации лизоцима C_1 растворимости S в ячейках с $0 < \varepsilon_L < 1$ и имеет вид

$$\frac{C_1}{\varepsilon_L} = S. \quad (11)$$

Система уравнений (1)–(3), (9)–(11) дополняется граничными и начальными условиями и решается неявным методом. Отметим, что в ячейках сетки с $0 < \varepsilon_L < 1$ все теплофизические данные, входящие в уравнения (1)–(3), (9)–(11), вычисляются с весами жидкой и твердой фаз.

Зарождение кристалла моделируется детерминистически, т. е. кристаллы зарождаются в тех ячейках, в которых пересыщение $\sigma = C_1/S$ достигает заданного предела пересыщения η , и вырастают мгновенно до размеров, при которых выполняется вышеупомянутое замыкающее соотношение.

Алгоритм расчета

Для того чтобы вызвать осаждение молекул лизоцима из раствора, необходимо создать концентрацию молекул лизоцима, существенно превышающую равновесную. Для раствора лизоцима это превышение составляет около 3 раз ($\eta = 3$). Реально оно может быть и выше до тех пор, пока не появится центр кристаллизации, и тогда спонтанно с высокой скоростью вырастает сравнительно крупный зародыш кристалла. При этом раствор лизоцима вблизи зародыша обедняется, так как молекулы лизоцима из раствора переходят в кристалл. Этот процесс идет до тех пор, пока концентрация лизоцима в ячейке с зародышем кристалла не сравняется с равновесной растворимостью лизоцима, зависящей, в свою очередь, от концентрации молекул осадителя C_2 . Далее процесс роста (или растворения) кристалла идет автоматически и определяется значением равновесной концентрации лизоцима на границе раздела фаз.

Таким образом, основной зависимостью, определяющей кинетику роста биокристаллов, является зависимость растворимости лизоцима S от концентрации осадителя C_2 . Для лизоцима эта зависимость в изотермическом приближении при $T = 18^\circ\text{C}$ имеет вид, представленный на рис. 1 [3].

В работе [4] приводятся зависимости растворимости S от температуры раствора для трех значений концентрации осадителя NaCl. Они имеют вид полиномов третьей степени от температуры T (рис. 2).

На рис. 3 приведено двумерное распределение растворимости лизоцима в зависимости от температуры и концентрации осадителя NaCl, полученное в работе [2].

Вводится дискретизация по временной координате с шагом τ_i , где i — номер шага по времени. Уравнения (1)–(3), (9)–(11) переходят в следующие уравнения:

$$\frac{\vec{V}^i - \vec{V}^{i-1}}{\tau_i} + (\vec{V}^i \nabla) \vec{V}^i = -\frac{1}{\rho^i} \nabla p^i + \nu \Delta \vec{V}^i - \beta_1 \vec{g} (C_1^i - C_{1(0)}) - \beta_2 \vec{g} (C_2^i - C_{2(0)}) - \beta_T \vec{g} (T^i - T_0); \quad (12)$$

$$\text{div} \vec{V}^i = 0; \quad (13)$$

$$\frac{T^i - T^{i-1}}{\tau_i} + \vec{V}^i \nabla T^i = \frac{1}{c_p^i \rho^i} \nabla \lambda^i \nabla T^i; \quad (14)$$

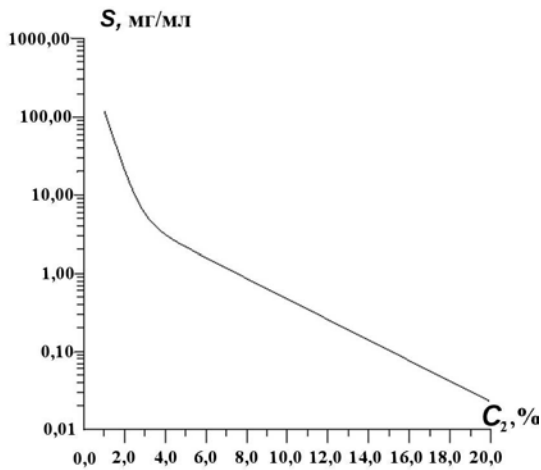


Рис. 1. Зависимость растворимости лизоцима от концентрации NaCl

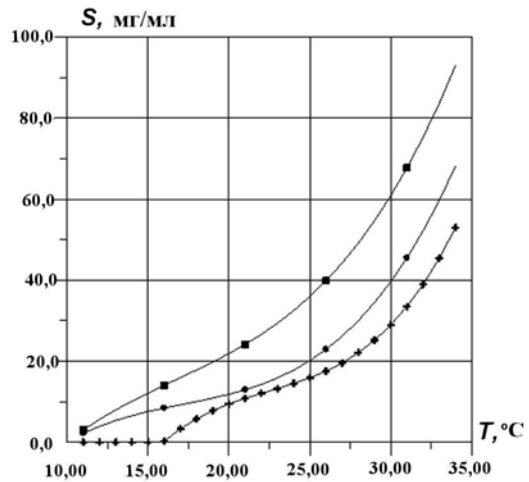


Рис. 2. Зависимость растворимости лизоцима от температуры: ■ — $C_2 = 2,1\%$; ● — $C_2 = 2,5\%$; + — $C_2 = 3\%$

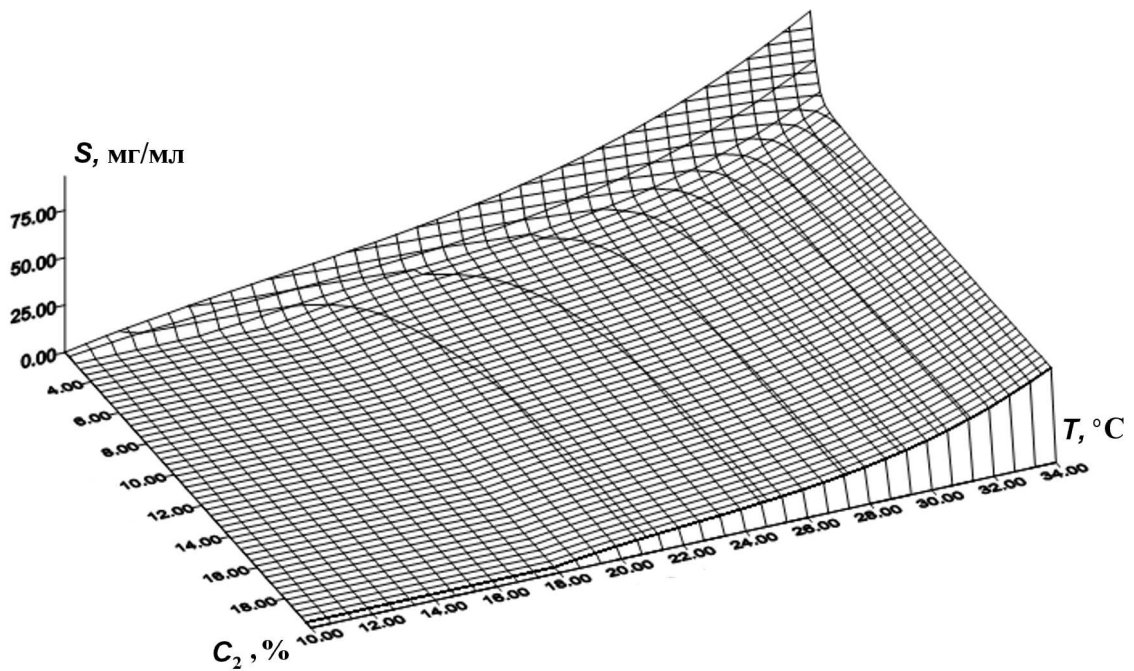


Рис. 3. Двумерное распределение растворимости лизоцима в зависимости от температуры и концентрации осадителя NaCl

$$\frac{\varepsilon_L^i C_1^i - \varepsilon_L^{i-1} C_1^{i-1}}{\tau_i} + \vec{V}^i \nabla C_1^i = \nabla D_1^i \nabla C_1^i - \frac{\partial \varepsilon_S^i}{\partial t} \rho_c \varepsilon_L^i; \quad (15)$$

$$\varepsilon_L^i \frac{\partial C_2^i}{\partial t} + \vec{V}^i \nabla C_2^i = \nabla D_2^i \nabla C_2^i + \frac{\partial \varepsilon_S^i}{\partial t} (1 - K_{p2}) C_2^i; \quad (16)$$

$$\frac{C_1^i}{\varepsilon_L^i} = S^i. \quad (17)$$

Для решения системы уравнений (12)—(17) используем метод, предложенный для решения уравнений гидродинамики в работе [5]. Систему уравнений (12), (14)—(16) можно представить в общем виде следующим образом:

$$\left(V_x \frac{\partial W^j}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \varepsilon_x^j x \frac{\partial W^j}{\partial x} \right) + \left(V_y \frac{\partial W^j}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \varepsilon_y^j y \frac{\partial W^j}{\partial y} \right) + \left(V_z \frac{\partial W^j}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \varepsilon_z^j z \frac{\partial W^j}{\partial z} \right) + \gamma^j W^j = F^j, \quad j = 1, \dots, 4, \quad (18)$$

где W^j — субстанциональная переменная, принимающая значения $V_x, V_y, V_z, T, C_1, C_2$, а $\varepsilon_x^j, \varepsilon_y^j, \varepsilon_z^j, \gamma^j, F^j$ — соответствующие им параметры.

Используя экспоненциальное преобразование, приводим уравнение (18) к виду

$$-\frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial x} \lambda \varepsilon_x \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial y} \omega \varepsilon_y \frac{\partial W}{\partial y} - \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial z} \eta \varepsilon_z \frac{\partial W}{\partial z} + \gamma W = F, \quad (19)$$

где $\lambda = e^{-\int_{x_0}^x \frac{V_x}{\varepsilon_x} dx}$; $\omega = e^{-\int_{y_0}^y \frac{V_y}{\varepsilon_y} dy}$; $\eta = e^{-\int_{z_0}^z \frac{V_z}{\varepsilon_z} dz}$.

Применив разнесенные сетки для компонент скоростей и интегральный метод аппроксимации, построим разностный аналог уравнения (19). Используя уравнение неразрывности (13) и применяя метод Патанкара—Сполдинга [6], строим конечно-разностное уравнение для давления p . Полученную нелинейную систему конечно-разностных уравнений для W и p линеаризуем и решаем, используя *неявный метод установления*. Отметим, что при таком подходе все получающиеся конечно-разностные системы линейных уравнений имеют монотонные матрицы коэффициентов.

Неявный метод установления заключается в следующем. На каждом временном шаге основной временной сетки вводится вспомогательная сетка по времени установления с шагом $\tilde{\tau}$ и в каждое из уравнений добавляется член с производной по времени от соответствующей функции. При этом на вспомогательной сетке по времени используется неявная схема аппроксимации. Уравнение для давления получается из разностного уравнения неразрывности, а уравнение (17) заменяется следующим уравнением:

$$\varepsilon_L^i = \tilde{\varepsilon}_L^i - \frac{\tilde{\varepsilon}_L^i}{\tilde{\rho}_c^i} \left(\frac{\tilde{C}_1^i}{\tilde{\varepsilon}_L^i} - \tilde{S}^i \right).$$

Полученная система уравнений на каждом шаге по времени решается до установления по следующему алгоритму:

Шаг 1. По заданным распределениям $\tilde{\varepsilon}_L, \tilde{V}_x, \tilde{V}_y, \tilde{V}_z, \tilde{p}$ на предыдущем шаге установления вычисляются $\tilde{T}, \tilde{C}_1, \tilde{C}_2, \tilde{S}$ и распределение пересыщений σ по формуле

$$\sigma = \begin{cases} 0 & \text{при } \tilde{\varepsilon}_L = 0; \\ \frac{\tilde{C}_1}{\tilde{\varepsilon}_L \tilde{S}} & \text{при } 0 < \tilde{\varepsilon}_L < 1. \end{cases}$$

Шаг 2. Рассчитывается распределение $\tilde{\varepsilon}_L$ по следующему алгоритму:

если $\tilde{\varepsilon}_L = 1$ и $\sigma < \eta$, то $\tilde{\varepsilon}_L = \tilde{\varepsilon}_L$;

если $\tilde{\varepsilon}_L = 1$ и $\sigma \geq \eta$ или $0 < \tilde{\varepsilon}_L < 1$, то $\tilde{\varepsilon}_L = \tilde{\varepsilon}_L - \frac{\tilde{\varepsilon}_L}{\rho_c} \left(\frac{\tilde{C}_1}{\tilde{\varepsilon}_L} - \tilde{S} \right)$.

Шаг 3. Рассчитывается распределение ε_L по следующему алгоритму.

Если в какой-нибудь ячейке получилось $\tilde{\varepsilon}_L < 0$, то это означает, что вся ячейка заполнилась кристаллом и еще осталась доля твердой фазы $\delta = |\tilde{\varepsilon}_L|$, которая должна перейти в одну из соседних ячеек. Положим, что эта избыточная доля твердой фазы переходит в ту ячейку, в которой доля жидкой фазы $\tilde{\varepsilon}_L$ имеет наибольшее значение. Тогда в данной ячейке полагаем $\varepsilon_L = 0$, а в соседней ячейке с наибольшей долей жидкой фазы $\tilde{\varepsilon}_L$ полагаем $\varepsilon_L = \tilde{\varepsilon}_L - \delta$.

Если же в какой-нибудь ячейке получилось $\tilde{\varepsilon}_L > 1$, то это означает, что весь кристалл в данной ячейке растворился и еще осталась доля жидкой фазы $\delta = \tilde{\varepsilon}_L - 1$, которая должна перейти в одну из соседних ячеек. Положим, что эта избыточная доля жидкой фазы переходит в ту ячейку, в которой доля жидкой фазы $\tilde{\varepsilon}_L$ имеет наименьшее значение. Тогда в данной ячейке полагаем $\varepsilon_L = 1$, а в соседней ячейке с наименьшей долей жидкой фазы $\tilde{\varepsilon}_L$ полагаем $\varepsilon_L = \tilde{\varepsilon}_L + \delta$.

В остальных ячейках полагаем $\varepsilon_L = \tilde{\varepsilon}_L$.

Шаг 4. Сравниваются ε_L и $\tilde{\varepsilon}_L$. Если нужная точность по ε_L не достигнута, то полагаем $\tilde{\varepsilon}_L = \varepsilon_L$, пересчитываем \tilde{T} , \tilde{C}_1 , \tilde{C}_2 , \tilde{S} , σ и возвращаемся на шаг 2. Итерации ведутся до сходимости.

Затем рассчитываем новые распределения давлений p , скоростей V_x , V_y , V_z и вычисляем $|\operatorname{div}\vec{V}|$. Если нужная точность по $|\operatorname{div}\vec{V}|$ не достигнута, то полагаем $\check{p} = p$, $\check{V}_x = V_x$, $\check{V}_y = V_y$, $\check{V}_z = V_z$, $\check{\varepsilon}_L = \varepsilon_L$ и возвращаемся на шаг 1.

После достижения требуемой точности вычисления $|\operatorname{div}\vec{V}|$ на вспомогательной временной сетке переходим к следующему временному шагу основной временной сетки.

Расчеты показали [2], что предложенная модель вполне адекватна моделируемому явлению и может быть использована для параметрических исследований и прогнозных расчетов процесса кристаллизации белков при переменных полях температур.

Результаты расчетов

Расчеты проводились в двумерной XU -геометрии. Область расчета представляет собой прямоугольник со сторонами 1,0 см по оси X и 0,1 см по оси U . Левая граница области при $x = 0$ является осью симметрии. На ней задано условие $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$. На остальных границах температура задавалась следующим образом:

$$T = \begin{cases} T_2 = 12^\circ \text{C} & \text{при } 0 < x < a; y = 0; \\ T_0 & \text{при } a < x < 1,0; y = 0; \\ T_0 & \text{при } 0 < x < 1,0; y = 0,1; \\ T_0 & \text{при } x = 1,0; 0 < y < 0,1, \end{cases}$$

где $a = 0,025$ см.

Для концентраций C_1 и C_2 на всех границах жидкой и твердой фаз и на оси симметрии задавалось условие $\frac{\partial C_i}{\partial n} = 0$ ($i = 1, 2$), где n — нормаль к границе. На правой границе области также задавалось условие $\frac{\partial C_i}{\partial x} = 0$.

Сетка задавалась равномерной. По оси X число узлов было равно 500, по оси U — 50. Скорость конвекции полагалась равной нулю, что соответствует нулевой силе тяжести. Теплофизические данные для расчета приведены в таблице.

Расчеты показали, что распределение концентрации осадителя C_2 быстро становится константой, равной $C_{2(0)}$ во всей области раствора. Это происходит потому, что коэффициент диффузии осадителя на порядок больше коэффициента диффузии лизоцима. Вытесненный на первой стадии роста из области выросшего кристалла осадитель NaCl быстро диффундирует в раствор и равномерно распределяется в нем. Поэтому уравнение (16) можно не решать уже после первых 100 с кристаллизации, полагая $C_2 = C_{2(0)}$ в области раствора.

Температурное поле устанавливается очень быстро, за время менее 100 с. На рис. 4 приведено установившееся распределение температур, соответствующее данным граничным условиям, на момент времени 100 с и распределение растворимости, соответствующее этому температурному полю и концентрации осадителя $C_{2(0)}$.

На рис. 5 приведены распределения пересыщений и концентраций лизоцима в момент времени $t = 1000$ с. Видно, что в ячейках, содержащих зародыши кристаллов, пересыщение стало равным единице.

Теплофизические данные

Величина	Значение	Величина	Значение
D_1	$1,0 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2/\text{с}$	k	$0,677 \cdot 10^5 \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К})$
D_2	$1,0 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$	c_p	$4218 \cdot 10^4 \text{ Дж}/(\text{г} \cdot \text{К})$
ν	$8,63 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$	β_T	$1,2 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}$
ρ_c	$1,2 \text{ г}/\text{см}^3$	β_1	$0,3 (\text{г}/\text{см}^3)^{-1}$
ρ_{NaCl}	$2,165 \text{ г}/\text{см}^3$	β_2	$0,6 (\text{г}/\text{см}^3)^{-1}$
$\rho_{\text{H}_2\text{O}}$	$1,0 \text{ г}/\text{см}^3$		

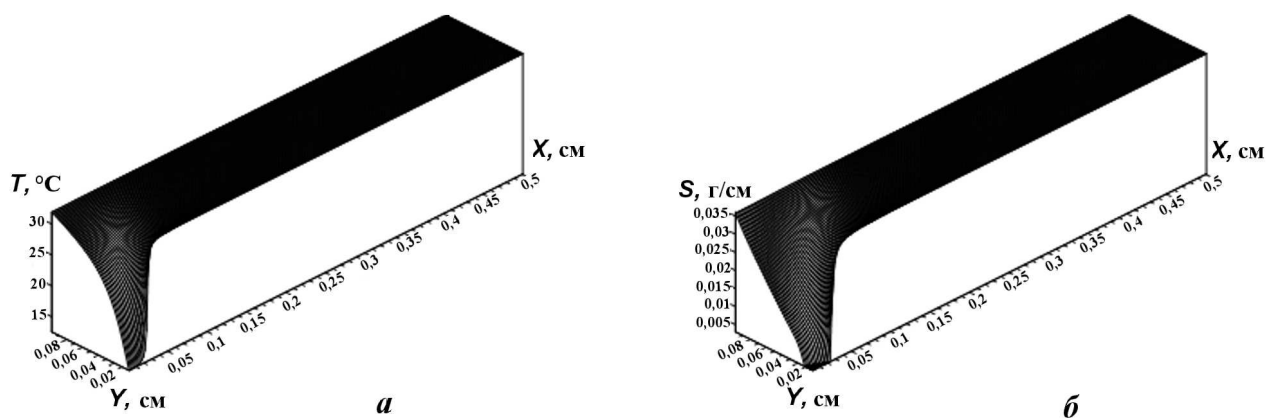


Рис. 4. Температурное поле (а) и растворимость (б) при $t = 100$ с

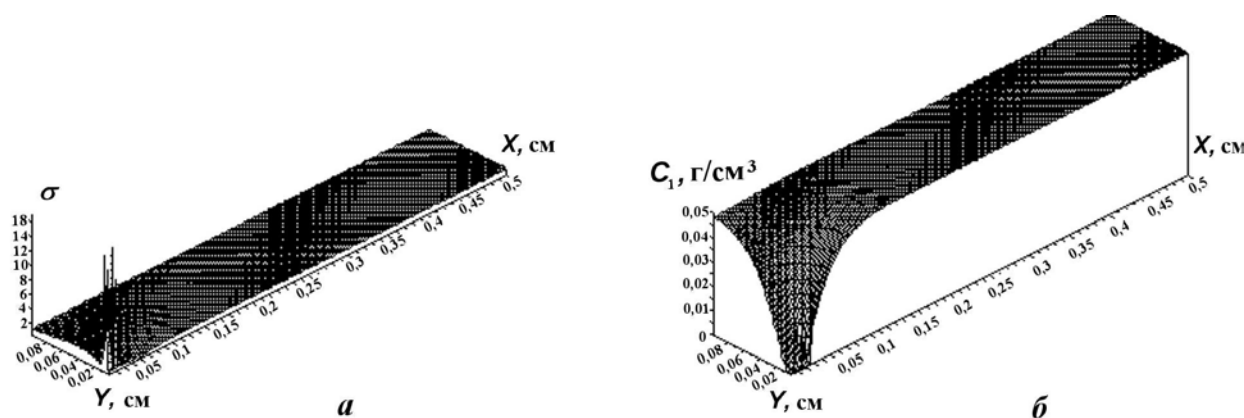


Рис. 5. Распределения пересыщений (а) и концентраций лизоцима (б) при $t = 1000$ с

Из рис. 4, 5 видно, что в начальный момент времени пересыщение было больше единицы во всей области расчета. В небольшой области, вблизи точки $x = 0, y = 0$, растворимость сильно уменьшается и, следовательно, пересыщение σ становится значительно больше η . В этой области согласно принятому условию ($\eta = 3$) возможны зарождение и рост нескольких кристаллов, что было подтверждено экспериментом [1]. В настоящей работе эти сценарии не рассматриваются

На рис. 6 приведены распределения пересыщений и концентраций лизоцима в момент времени $t = 900\,000$ с. Видно, что они существенно отличаются от аналогичных распределений в момент времени $t = 1\,000$ с, приведенных на рис. 5. Пересыщение во всей области раствора, кроме области вблизи выросшего кристалла, равно единице. Вблизи кристалла пересыщение больше единицы, что означает возможность роста кристалла. Однако градиент концентрации лизоцима везде практически равен нулю, что делает невозможным перенос "строительного материала" к поверхности выросшего кристалла, на которой концентрация растворенного лизоцима равна равновесной растворимости S .

На рис. 7 представлена динамика роста кристалла в разные моменты времени. Из приведенных на рисунке данных следует, что к моменту времени $t = 600\,000$ с рост кристалла практически прекратился. Сравнение с экспериментом показало, что в целом процесс зарождения и роста кристаллов по данной модели воспроизводится верно.

На рис. 8 представлены зависимости массы растущего кристалла от времени при разных значениях температуры T_c охлаждающей иглы. Видно, что при температуре иглы $T_c = 12^\circ\text{C}$ кристалл растет значительно быстрее и вырастает до большего размера, чем при температуре $T_c = 20^\circ\text{C}$. Это свидетельствует о возможности управления скоростью роста кристалла путем изменения температуры охлаждающей иглы во время эксперимента.

На рис. 9 показано, как изменяется скорость роста кристалла при двух вариантах изменения температуры охлаждающей иглы:

- 1) в начальный отрезок времени $0 < t < 100\,000$ с температура иглы равна $T_c = 20^\circ\text{C}$, а затем скачком падает до $T_c = 12^\circ\text{C}$;
- 2) в начальный отрезок времени $0 < t < 700\,000$ с температура иглы равна $T_c = 20^\circ\text{C}$, а затем скачком падает до $T_c = 12^\circ\text{C}$.

В настоящей работе с помощью предложенной модели численно исследованы два способа увеличения скорости роста и массы кристалла:

- 1) с торца капилляра происходит постоянная подпитка концентрации лизоцима, так что его концентрация на торце равна константе в течение всего эксперимента;
- 2) одновременно с подпиткой лизоцима по первому способу происходит расширение зоны локального охлаждения по направлению к торцам капилляра с постоянной скоростью V_{ex} .

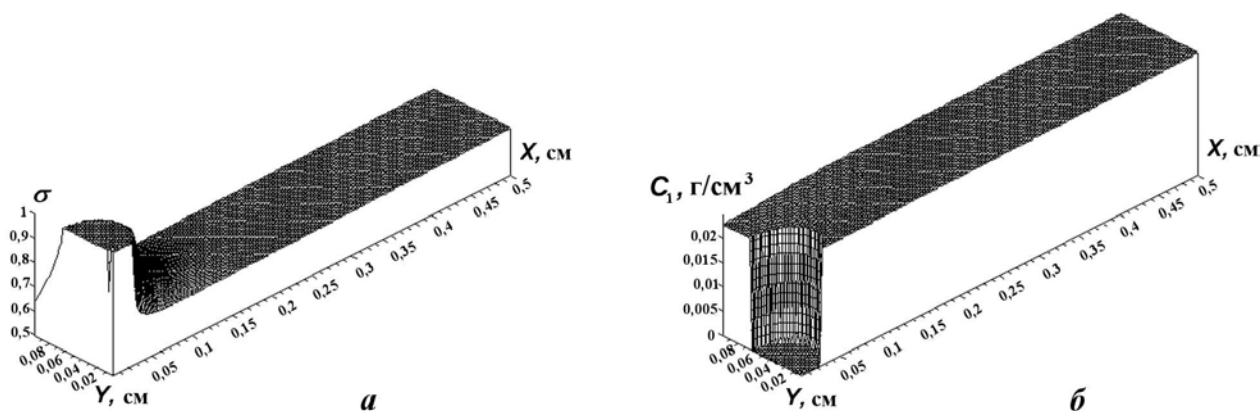


Рис. 6. Распределения пересыщений (а) и концентраций (б) лизоцима при $t = 900\,000$ с

На рис. 10 представлены зависимости массы кристалла от времени для этих двух способов. Видно, что при втором способе скорость роста значительно выше, чем при первом.

На рис. 11 представлены для сравнения формы кристаллов, полученных по способам 1 и 2, на момент времени $t = 700\,000$ с.

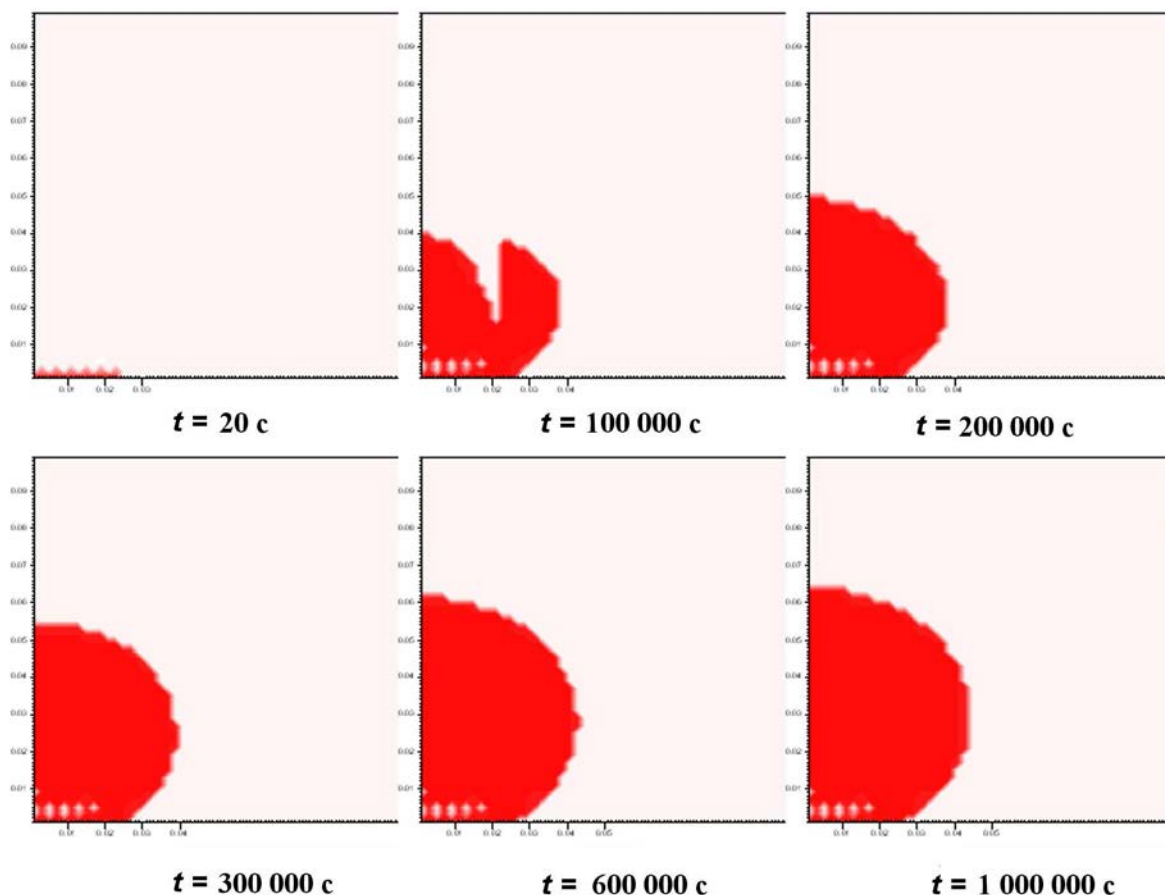


Рис. 7. Динамика роста кристалла в разные моменты времени

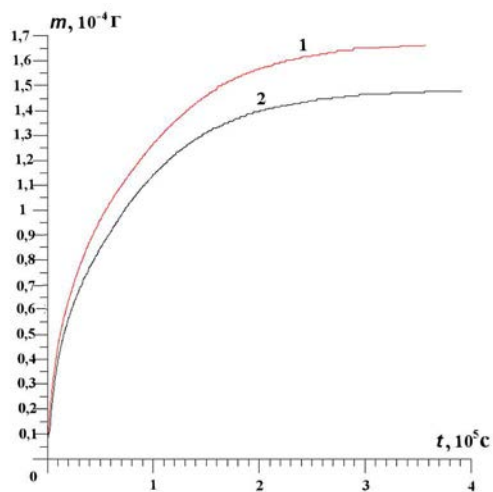


Рис. 8. Зависимости массы кристалла от времени при двух значениях температуры охлаждающей иглы: 1 — $T_c = 12\text{ }^\circ\text{C}$; 2 — $T_c = 20\text{ }^\circ\text{C}$

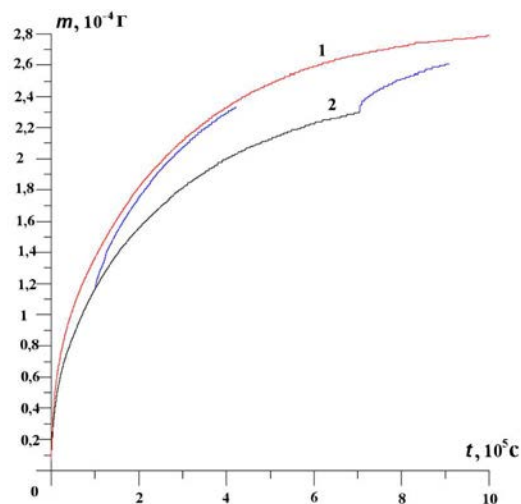


Рис. 9. Зависимости массы кристалла от времени при двух вариантах изменения температуры иглы в течение эксперимента: 1 — вариант 1; 2 — вариант 2

Из этих данных следует, что вариацией двух параметров — подпиткой концентрации лизоцима с торцов капилляра и изменением скорости расширения зоны локального охлаждения V_{ex} , можно получить кристаллы любого размера и формы.

Преыдущие результаты были получены при отсутствии конвекции, т. е. при нулевой силе тяжести. На рис. 12 представлены кривые роста массы кристалла с учетом и без учета конвекции в начальной фазе эксперимента (в течение первых 360 с), когда все упомянутые выше способы выращивания дают примерно одинаковые результаты. Из этого рисунка видно, что конвекция приводит к заметному увеличению скорости роста (в 2—4 раза на начальной стадии) и ее необходимо учитывать при проведении модельных расчетов.

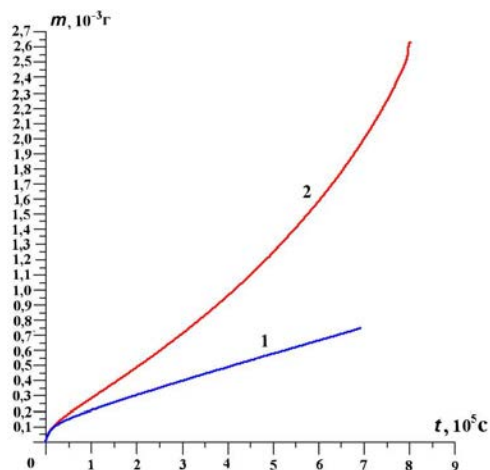


Рис. 10. Зависимости массы кристалла от времени для двух способов выращивания: 1 — способ 1 ($V_{ex} = 0$); 2 — способ 2 ($V_{ex} = 4,7 \cdot 10^{-7} \text{ см/с}$)

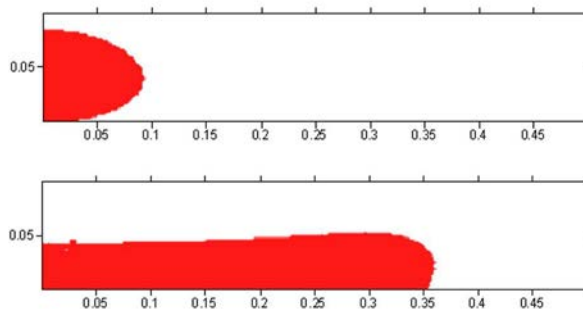


Рис. 11. Формы кристаллов, полученных по способам 1 ($V_{ex} = 0$, сверху) и 2 ($V_{ex} = 4,7 \cdot 10^{-7} \text{ см/с}$, внизу), $t = 700\,000 \text{ с}$

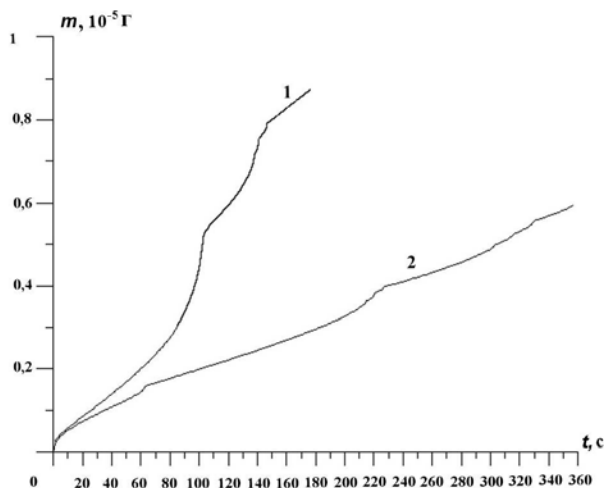


Рис. 12. Зависимости массы кристалла от времени: 1 — с учетом конвекции; 2 — без учета конвекции

Выводы

Показана возможность получения контролируемого роста биокристаллов под управляющим воздействием температурного поля. Предложена математическая модель, описывающая процесс за-

рождения и роста кристаллов белка из раствора под указанным воздействием. Просчитан эксперимент по выращиванию кристалла лизоцима из водного раствора при точечном воздействии температуры на процесс роста. Получено качественное согласие результатов расчета и эксперимента.

Рассмотрены два способа выращивания кристаллов большого размера с контролируемой скоростью роста: 1) с подпиткой концентрации лизоцима с торцов капилляра; 2) с изменением скорости расширения зоны локального охлаждения.

Показано, что учет конвекции приводит к значительному увеличению скорости роста кристалла. Следовательно, ее необходимо учитывать при моделировании роста кристалла.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-02-97519.

Список литературы

1. *Безбах И. Ж., Захаров Б. Г., Стрелов В. И., Артемьев В. К., Гинкин В. П., Фоломеев В. И., Косушкин В. Г.* // Моделирование процесса управления ростом кристаллов белков в земных и космических условиях. Тр. 6-й Межд. конф. "Рост монокристаллов и тепломассоперенос" Обнинск, 2005. Т. 3. С. 545–551.
2. *Гинкин В. П., Ганина С. М., Стрелов В. И., Безбах И. Ж., Захаров Б. Г.* Математическая модель роста биокристаллов под воздействием управляющего теплового поля // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 2. С. 17–24.
3. *Otalora F., Garcia-Ruiz J. M.* Crystal growth studies in microgravity with the APCF. I. Computer simulation of transport dynamics // J. Crystal Growth. 1997. Vol. 182. P. 141–154.
4. *Rosenberger F., Howard S. B., Sowers J. W., Nyce T. A.* Temperature dependence of protein solubility — determination and application to crystallization in X-ray capillaries // Ibid. 1993. Vol. 129. P. 1–12.
5. *Ginkin V.* Methods of solution of convective heat mass transfer at single crystal growth problem // Proc. 2-nd Int. Symposium on Advances in Computational Heat Transfer. Palm Cove, Queensland, Australia. 2001. Vol. 2. P. 1161–1168.
6. *Patankar S. V., Spalding D. B.* A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows // J. Heat Mass Transfer. 1972. Vol. 15. P. 1787–1806.

Статья поступила в редакцию 19.10.09.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Володина Н. А., Мышкина И. Ю., Спиридонов В. Ф.</i> Исследование влияния счетных параметров при численном моделировании процесса взрывчатого превращения ВВ по кинетике МК в методике ЛЭГАК	3
<i>Гончаров Е. А., Колобянин В. Ю., Янилкин Ю. В.</i> Об определении искусственной вязкости для компонентов смешанных ячеек	15
<i>Гаджиев А. Д., Завьялов В. В., Шестаков А. А.</i> Применение TVD-подхода к DS_n -методу решения уравнения переноса теплового излучения в осесимметричной RZ -геометрии	30
<i>Тихомиров Б. П.</i> Автомодельные тепловые волны от сосредоточенного или объемного источника в среде с неоднородными теплофизическими параметрами	40
<i>Николаева О. В., Басс Л. П., Кузнецов В. С., Синица В. В., Цофин В. И.</i> Методика решения уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов при табличном задании групповых сечений рассеяния и ее применение для расчета защиты реактора ВВЭР-1000	51
<i>Гинкин В. П., Ганина С. М., Гинкина О. М.</i> Математическая модель кристаллизации растворов под управляющим воздействием температурного поля на примере выращивания биокристаллов	64

CONTENTS

<i>Volodina N. A., Myshkina I. Yu., Spiridonov V. F.</i> Study of the computational parameters effect at numerical simulation of the explosive transformation process over MC kinetics in the LEGAK technique	3
<i>Goncharov E. A., Kolobyenin V. Yu., Yanilkin Yu. V.</i> On the determination of artificial viscosity for mixed cell components	15
<i>Gadzhiev A. D., Zavyalov V. V., Shestakov A. A.</i> Application of the TVD-approach to the DS_n -method for the heat radiation transport equation solution in the axially-symmetric RZ -geometry	30
<i>Tikhomirov B. P.</i> Self-similar heat waves from a concentrated or spatial source in an environment with non-homogeneous thermal-physical parameters	40
<i>Nikolaeva O. V., Bass L. P., Kuznetsov V. S., Sinitsa V. V., Tsofin V. I.</i> Solution technique for neutron and gamma-quantum transport equation at tabulated input scattering group cross-sections and its application for the VVER-1000 reactor protection	51
<i>Ginkin V. P., Ganina S. M., Ginkina O. M.</i> A computational model of solution crystallization under control action of temperature field for the case of biocrystal growth	64

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Л. В. Мазан,
Е. Н. Старченко

Корректоры В. В. Барышникова,
Е. А. Окатьева

Подписано в печать 12.04.10

Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 10

Тираж 1000 экз.

Зак. тип.

6 статей

Формат 60×84/8

Уч.-изд. л. ~ 14

Индекс 3642

Оригинал-макет подготовлен в Математическом отделении
Всероссийского научно-исследовательского института
экспериментальной физики

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188 г. Саров Нижегородской обл.

ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате WinWord или LATEX (с использованием стандартного стиля article).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

- 1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);
- 2) разрешение на опубликование от организации, в которой выполнена работа;
- 3) сведения об авторе (авторах): полные фамилия, имя, отчество; паспортные данные, адрес места жительства; место работы, табельный номер, должность, ученая степень и ученое звание; контактные адреса и телефоны, e-mail;
- 4) соглашение, подписанное авторами, об их долевом участии в создании статьи (если авторов несколько).

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны полностью соответствовать указанным в представленной рукописи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием статьи необходимо указать УДК. Разделы и подразделы текста должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, закрепленное соответствующими стандартами по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Необходимо делать пометки для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например, a и α ("альфа"), v и ν ("ню")). Строчные (малые) буквы следует помечать двумя черточками сверху (например, \bar{c} , \bar{k} , \bar{z} , \bar{d}), а прописные (большие) — двумя черточками снизу (например, \underline{C} , \underline{K} , \underline{Z} , \underline{Q}). Для отличия цифры 0 от буквы O цифру следует перечеркивать косой чертой. Должны различаться по написанию единица, штрих и запятая в индексах, а также буквы e и l , I и J . Необходимо выделять (жирным шрифтом или стрелкой) векторные величины.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисуночные подписи. Рисунки также необходимо представить в виде графических файлов (предпочтительны форматы .tif и .bmp). Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют цифровыми обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисуночной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАНТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail: sokol@vniief.ru