

# Моделирование динамических процессов в сплошных средах. Модели и методы \*

В.Ф.КУРОПАТЕНКО

*Российский Федеральный Ядерный Центр - ВНИИТФ им. академика Забабахина,  
г. Снежинск, Россия*

e-mail: v.f.kuropatenko@vniitf.ru

Рассматривается эволюция численных методов и развитие моделей механики сплошных сред, создаваемых для математического моделирования динамических процессов во второй половине XX века. Излагаются принципы построения прикладных уравнений состояния (УРС) металлов, горных пород, взрывчатых веществ и продуктов взрыва. Рассмотрены методы расчета ударных волн и, в частности неоднородный метод, в котором ударные волны, контактные разрывы, слабые разрывы и линии фазовых переходов выделяются в решении. Они образуют сетку особенностей, перемещающуюся относительно регулярной сетки и взаимодействующую с ней. Излагается явный безусловно устойчивый метод расчета мелких неоднородностей в сплошной среде.

Эпоха математического моделирования началась в 1950 году, когда Д.Нейман и Р.Рихтмайер опубликовали метод расчета ударных волн, который они создали и применили для расчетов ядерного оружия США. Первая советская ЭВМ "СТРЕЛА" имела быстродействие  $2 \cdot 10^3$  операций в секунду и маленькую память. Проблема повышения точности математического моделирования динамических процессов при таких скудных ресурсах могла быть решена только с помощью максимально точных численных методов. В работе рассматривается эволюция численных методов и развитие моделей механики сплошных сред применительно к моделированию широкого класса динамических процессов, включающих:

- Ударные и детонационные волны, их взаимодействие друг с другом, с контактными границами, слабыми разрывами и волнами разрезания и сжатия.
- Тепловые и радиационные воздействия на окружающую среду.
- Упругие и пластические деформации и разрушение первоначально твердых тел.
- Полиморфные фазовые переходы, плавление, испарение, ионизацию.
- Перемешивание веществ как следствие неустойчивости контактных границ.

Работы по созданию системы математических методов и компьютерных программ для математического моделирования динамических процессов в сложных конструкциях начались в РФЯЦ-ВНИИТФ в 1956 году под руководством Яненко Н.Н. Специфика

---

\*Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №10-01-00032.

решаемых задач требовала, чтобы несмотря на очень ограниченные возможности электронных вычислительных машин (ЭВМ) точность прогнозирования характеристик моделируемых конструкций была бы высокой. Для обеспечения решения этой задачи были развернуты работы по совершенствованию уже имеющихся методов расчета систем нелинейных уравнений в частных производных гиперболического, параболического и эллиптического типов и по созданию новых методов. Одновременно разрабатывались аналитические решения, которые позволяли контролировать точность численных методов. В основе всех применяемых и создаваемых моделей физических процессов лежали законы сохранения массы, импульса и энергии. Для описания свойств конкретных материалов использовались уравнения состояния (УРС). За период 1955-1963 гг, т.е. до отъезда Яненко Н.Н. в г.Новосибирск, для развития математического моделирования в институте были сделаны крупные шаги. За это время был создан метод дробных шагов для уравнения теплопроводности в двумерной постановке. Впервые идею этого метода высказали в 1955г. Писман и Рэкфорд. В 1957г. Багриновский К.А. и Годунов С.К. опубликовали [1] результаты применения идеи этого метода в гидродинамике. В 1959г. были опубликованы результаты исследования и обоснования метода дробных шагов в РФЯЦ-ВНИИТФ под руководством Яненко Н.Н [2]. В настоящее время метод расщепления по направлениям и по физическим процессам широко применяется во всём мире.

При динамических внешних воздействиях на сплошную среду нелинейность законов сохранения массы, импульса и энергии является причиной возникновения и существования сильных разрывов - ударных волн. На поверхности сильных разрывов законы сохранения принимают вид нелинейных алгебраических уравнений, связывающих скачки величин по обе стороны разрыва. На сильном разрыве терпит скачок и энтропия. В этом заключается принципиальное различие между ударными волнами и волнами с непрерывным изменением величин.

К 1959г. были опубликованы три метода расчета ударных волн: метод Неймана-Рихтмайера [3] и метод Лакса [4] в США и метод Годунова [5] в СССР. Все три метода были однородными. Поверхности сильных разрывов в них заменялись слоями конечной ширины, в которых вещество быстро сжималось. В методе Неймана-Рихтмайера диссипация энергии в слое "размазанной" ударной волны обеспечивалась введением в уравнения импульса и энергии математической вязкости, которая содержала эмпирические постоянные величины. Недостатком этого метода были осцилляционные явления за фронтом ударной волны и необходимость корректировать эмпирические постоянные в зависимости от применяемого уравнения состояния.

В методе Лакса диссипация энергии обеспечивалась специальным выбором разностных уравнений, т.е. "аппроксимационной" вязкостью. Т.о. и в том, и в другом методе механизмы диссипации энергии были сугубо математическими. К тому же оказалось, что метод Лакса сильно размывает любые разрывы, в том числе и контактные, и таким образом он оказался непригоден для расчета процессов в конструкциях с большим количеством контактных границ. Вторым серьезным недостатком метода Лакса было изменение решения при равном нулю шаге по времени.

В методе Годунова для моделирования диссипации энергии используется ударная волна, возникающая при распаде произвольного разрыва на границе между двумя соседними ячейками сетки. Вообще говоря, табличные функции дают возможность интерпретировать их поведение между узлами таблицы по-разному. Произвольные разрывы на границах сеточных ячеек возникают в случае, если предполагается что функции между узлами кусочно-постоянны. По законам механики сплошных сред произвольные

разрывы распадаются с образованием волн разрежения и ударной волны, которая и определяет диссипацию энергии. Т.о. в методе Годунова механизм диссипации энергии является физическим. В нем отсутствуют эмпирические постоянные, что безусловно является достоинством. В то же время распад произвольного разрыва рассчитывается и в случае непрерывных функций, где энтропия обязана сохраняться.

В период 1957-1959гг. все три метода были опробованы для расчетов задач с динамическими процессами, были выявлены их достоинства и недостатки, и была сформулирована задача создания метода, имеющего минимум известных недостатков. Все эти работы велись под руководством Яненко Н.Н. Такой метод был создан и опубликован в 1960 г. [6].

За большой личный вклад в создание системы математического моделирования сложных физических процессов в РФЯЦ-ВНИИТФ Яненко Н.Н. вместе с группой учеников уже после отъезда из г. Снежинска была присуждена в 1972 г. Государственная премия СССР. Научный руководитель РФЯЦ-ВНИИТФ академик АН СССР Забабихин Е.И. в 1980 г. поддержал предложения о присвоении Яненко Н.Н. звания Героя Социалистического Труда.

Результаты сравнения четырех методов расчета ударных волн, основанных на четырех различных механизмах диссипации энергии, были изложены в монографии Рождественского Б.Л. и Яненко Н.Н. [7]. Существенным недостатком всех четырех однородных методов расчета ударных волн является образование "энтропийных следов" в окрестностях контактных границ и в местах заметного изменения пространственной сетки. Кстати, название "энтропийные следы" было предложено автором в 1959г. и проанализировано в [7]. Кроме того, более поздние исследования дистракции разностных методов показали [8], что во всех методах слабые ударные волны размазываются на большое число сеточных пространственных интервалов.

С целью недопущения нежелательных счетных феноменов был создан неоднородный разностный метод [9], выделяющий все особенности в решении: фронты ударных и детонационных волн, слабые разрывы, являющиеся крайними характеристиками волн разрежения, контактные границы и линии фазовых переходов. Эти особенности, взаимодействуя друг с другом, порождают новые особенности, которые в дальнейшем счете тоже выделяются. Метод реализован в комплексе программ ВОЛНА [9] и не имеет мировых аналогов. В течение многих лет метод применяется для математического моделирования динамических процессов в сложных конструкциях, спецификой которых является изменение характеристик вещества в диапазоне температур от 0 до  $10^6$  К и давления в диапазоне  $-10 \leq P \leq 10^4$  ГПа. Иными словами, вещество последовательно переходит из состояния твердого тела в жидкость, затем в газ и далее в состояние плазмы. Применение неоднородного разностного метода для моделирования поведения сплошной среды под действием динамических нагрузок обеспечило высокую точность расчетов характеристик сложных конструкций при малом числе точек пространственной сетки и позволило, таким образом, преодолеть хроническое отставание вычислительной техники СССР от США.

В докладе излагаются принципы построения прикладных уравнений состояния (УРС) металлов и горных пород, УРС взрывчатых веществ и сами уравнения состояния, обеспечивающие высокую точность описания материалов в указанном выше диапазоне давлений и температур и сжатий до 15-20. Условия плавления, испарения и ионизации у каждого компонента индивидуальны, поэтому УРС должно описывать поведение вещества в широком диапазоне температур, давлений и плотностей. При построении широко-

диапазонных УРС вид функциональных зависимостей термодинамических потенциалов устанавливается с помощью теоретических моделей поведения вещества, а конкретные теоретические или экспериментальные данные используются для определения численных значений коэффициентов в этих зависимостях. Общие вопросы построения УРС имеют одинаковое отношение к любому веществу.

УРС связывает величины макроуровня - термодинамические характеристики сплошной среды. Для их получения всегда совершается переход от микроуровня к макроуровню. Основой такого перехода являются модели микроуровня, при построении которых, как правило, делаются упрощающие предположения, ограничивающие область их применимости.

Разные физические модели макроуровня требуют знания разных теплофизических свойств. Однако есть величины, знание которых нужно в каждой модели независимо от диапазона изменения термодинамических величин. Это, прежде всего, давление  $P$ , которое определяется шаровым тензором напряжений. В газах, жидкостях и твердых телах кроме  $P$  есть также поверхностные силы, зависящие от ориентации площадок, на которые они действуют. Эти силы определяются девиатором тензора напряжений. К таким силам относится вязкость, работа которой на деформациях определяет диссипацию энергии. В твердых телах дело обстоит несколько сложнее, поскольку деформации могут быть обратимыми (упругие) и необратимыми (пластические). Энтропия растет только в случае пластических деформаций и остается постоянной в случае упругих. Однако, несмотря на существование отличного от нуля девиатора тензора напряжений, связь между  $P$  и удельным объемом  $V$  есть зависимость между шаровыми частями соответствующих тензоров. Следовательно, построение уравнения  $F(P, V, E) = 0$  или  $\Phi(P, V, T) = 0$  является основной задачей независимо от применяемой физической и математической модели.

УРС должно точно аппроксимировать экспериментальные и теоретические данные о термодинамических свойствах веществ. Это необходимо для обеспечения точности математического моделирования динамических процессов. Под точным описанием экспериментальных и теоретических данных понимается такое описание, когда отклонение УРС от исходных данных не превышает погрешности этих данных.

В пределах существования каждой фазы поверхность УРС должна быть непрерывной и гладкой. Разрывы термодинамических функций или разрывы их производных, т.е. изломы поверхности УРС, не отражающие физические свойства вещества, приводят к потере точности результатов математического моделирования. Разрывы термодинамических функций или их производных на границах устойчивых фазовых состояний диктуются физикой дела и они должны учитываться в математической модели, претендующей на моделирование фазовых переходов.

Для описания неравновесных фазовых переходов и релаксационных процессов в метастабильных областях (области отрицательных давлений, упругих сдвигов, области переохлажденной жидкости и перегретого газа) к уравнениям механики сплошной среды добавляются кинетические уравнения.

В докладе рассматривается также явный, безусловно устойчивый разностный метод расчета мелких неоднородностей в сплошной среде. Для контроля точности моделирования конкретных течений газов и конденсированных сред создана система аналитических решений.

Для моделирования перемешивания или сепарации веществ рассмотрена созданная модель многокомпонентной среды, в которой законы сохранения компонентов при сум-

мировании переходят в законы сохранения смеси. Необходимым условием такого преобразования является кластерное взаимодействие компонентов со смесью. Модель смеси, учитывающая кластерное взаимодействие, является единственной.

В рамках модели многокомпонентной среды изучен вопрос об ударных волнах в смеси. Во многих ранее опубликованных работах ударные адиабаты смесей определялись экспериментально путем измерения скорости ударной волны  $D$  в смеси и восстановления массовой скорости  $U$  методом отражения по скоростям в экранах или ударниках. Как правило, ударная адиабата смеси определялась в предположении, что смесь является однородным веществом. Такой подход может быть оправдан для компонентов с близкими свойствами и в узком диапазоне объемных концентраций. В случае, когда плотности компонентов сильно различаются или объемная концентрация одного из них близка к нулю или единице, справедливость такого подхода вызывает сомнения. Одна из убедительных попыток поколебать классический подход к определению ударной адиабаты смеси изложена в [10]. Показано, что в некоторых смесях с объемной концентрацией тяжелого компонента  $\alpha = 0,2$ , давление на ударной волне изменяется вследствие релаксационных процессов задолго до того, как ее догонит волна разгрузки от тыльной поверхности ударника.

Многочисленные экспериментальные и теоретические исследования по изучению распространения ударных волн в многокомпонентных средах позволяют сделать вывод, что ударная волна в МКС не расщепляется на несколько сильных разрывов. Основываясь на этих наблюдениях, вводится в рассмотрение скорость распространения сильного разрыва в смеси в лагранжевых координатах  $W = \frac{dm}{dt}$ . Сильный разрыв - это поверхность на которой все характеристики компонентов и смеси изменяются скачком. Независимо от состояния компонентов перед разрывом их состояние за разрывом всегда неравновесно:  $U_i \neq U_j$ ,  $P_i \neq P_j$ ,  $T_i \neq T_j$ . На поверхности сильного разрыва (за ним) начинаются релаксационные процессы установления равновесия  $U_i - U_j \rightarrow 0$ ,  $P_i - P_j \rightarrow 0$ ,  $T_i - T_j \rightarrow 0$ . Эти процессы протекают в области конечного размера, которая трактуется как ширина фронта ударной волны. Таким образом, условия на ударной волне в смеси - это законы сохранения, записанные для состояний вещества перед сильным разрывом и в конце области релаксации. Изложенная выше структура величин в ударной волне качественно согласуется с экспериментальными данными, полученными в [10].

## Список литературы

- [1] БАГРИНОВСКИЙ К.А., ГОДУНОВ С.К. Разностные методы счета многомерных задач // ДАН СССР. 1957. Т.115, №3. С.431.
- [2] ЯНЕНКО Н.Н., СУЧКОВ В.А., ПОГОДИН Ю.Я. О разностном решении уравнения теплопроводности в криволинейных координатах // ДАН СССР. 1959. Т.128, №5. С.901-905.
- [3] NEUMAN J., RICHTMEYER R.A. Method for the numerical calculation of hydrodynamical stocks // Appl.Phys. 1950. Vol.21, №3. P.232-237.
- [4] LAX P.D. Weak solution of nonlinear hyperbolic equation and their numerical computations // Comm.Pure and Appl. Math. 1954. Vol.7. P.159-193.
- [5] ГОДУНОВ С.К. Разностный метод счета разрывных решений уравнений газодинамики // Матем. сб. 1959. №4(99), Вып.3. С.271-306.
- [6] КУРОПАТЕНКО В.Ф. Метод расчета ударных волн // ДАН СССР. 1960. В.3, №4. С.771.

- 
- [7] РОЖДЕСТВЕНСКИЙ Б.Л., ЯНЕНКО Н.Н. Системы квазилинейных уравнений и их применение к газовой динамике. М.: Наука, 1968. 592 с.
- [8] КУРОПАТЕНКО В.Ф., МАКЕЕВА И.Р. Исследование дистракции разрывов в методах расчета ударных волн // Математическое моделирование. 2006. Т.18, №3. С.120-128.
- [9] КУРОПАТЕНКО В.Ф., КОВАЛЕНКО Г.В., КУЗНЕЦОВА В.И. и др. Комплекс программ ВОЛНА и неоднородный разностный метод для расчета неустановившихся движений сжимаемых сред // ВАНТ, Сер. Методики и программы числ.решения задач матем. физики. 1989. Вып.2. С.9-17.
- [10] ДОЛГОВОРОДОВ А.Ю., ВОСКОВОЙНИКОВ И.М., ТОЛСТОВ И.К., СТАРИКОВ А.В. Особенности распространения ударных волн в смесях // ФГВ. 1992. Т.28, №3. С.100-111.