

Математическое моделирование как инструмент для описания сложных физических процессов

***Инга Равильевна Макеева,
Денис Александрович Варфоломеев***

***Научная сессия НИЯУ МИФИ
по направлению «Инновационные ядерные технологии»
19 – 22 декабря 2017 г., Снежинск***

***Посвящается профессору
Валентину Федоровичу
Куропатенко (1933-2017)***



Научная и трудовая деятельность В.Ф. Куропатенко (1956-2017) была посвящена разработке математических и компьютерных моделей и их применению для решения комплексных задач, связанных с исследованием поведения различных сред в условиях динамических процессов

Математическое моделирование. Факторы развития



Элементы математического моделирования использовались с самого начала появления точных наук

- первые методы вычислений – Ньютон и Эйлер
- слово «алгоритм» – от имени средневекового арабского ученого Аль-Хорезми.

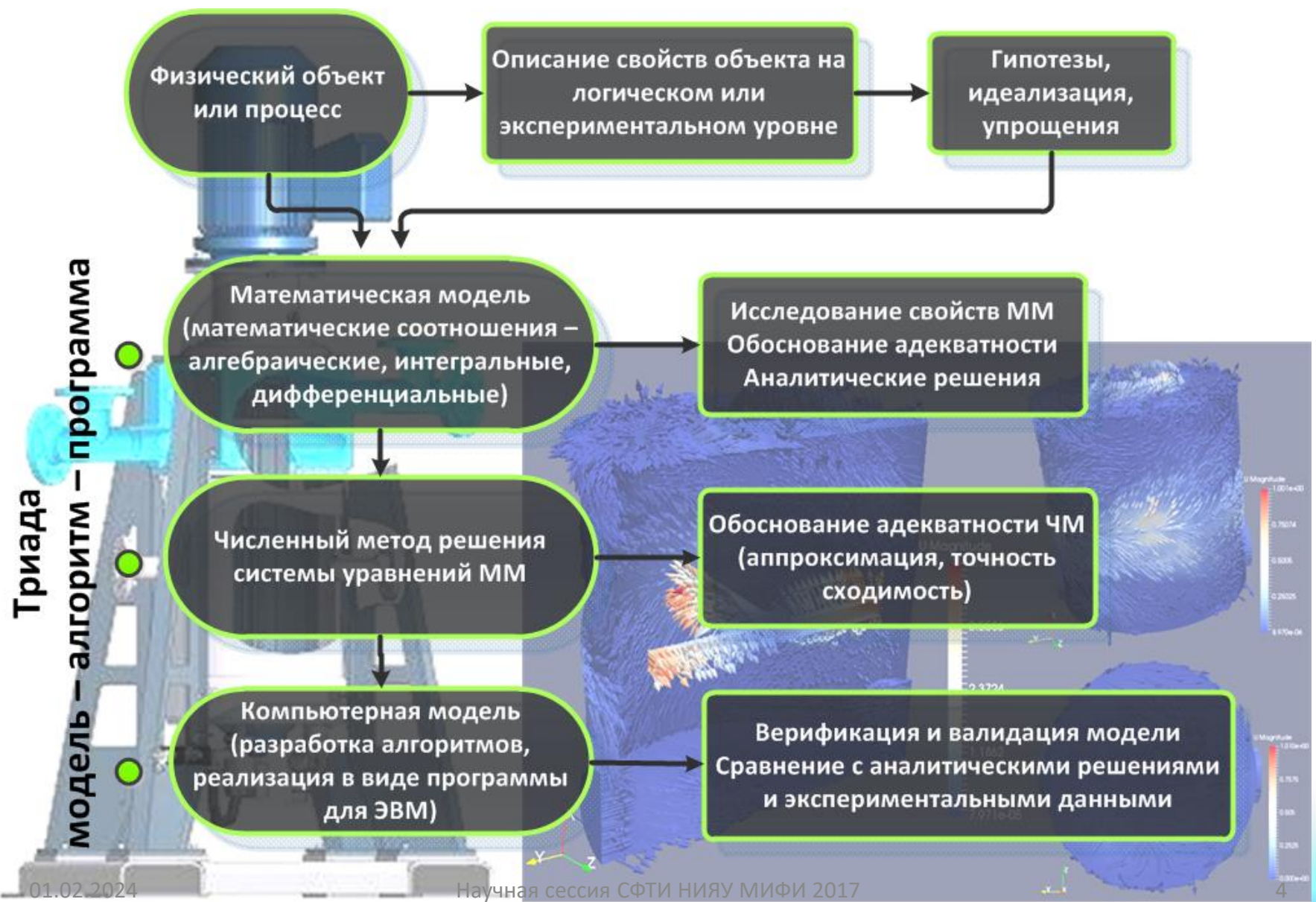
Бурное развитие матмоделирования – конец 40-х—начало 50-х годов XX века.
Причины:

- появление ЭВМ (компьютеров), избавивших ученых от огромной по объему рутинной вычислительной работы.
- беспрецедентный социальный заказ — выполнение национальных программ СССР и США по созданию ракетно-ядерного щита, которые не могли быть реализованы традиционными методами.

Экспериментальное изучение

- сложных высокоинтенсивных или длительных процессов – трудоемкое и дорогостоящее
- эксперименты проводятся при некоторых диапазонах изменения физических параметров
- в некоторых случаях являются невозможными.

Этапы математического моделирования



Модели механики сплошной среды

Применяются для описания широкого класса процессов и явлений

Поведение газов, жидкостей, твердых тел в условиях динамических и статических нагрузок

Высокоинтенсивное взаимодействие тел

Ударные волны и высокотемпературные явления и т.д.

В основе – гипотеза о непрерывности сплошной среды

Законы сохранения массы, импульса энергии в дифференциальной форме

Свойства веществ от твердого тела до плазмы

Определяющие уравнения (вязкость, упругость, пластичность)

Структура моделей МСС

Адиабатическое ядро \equiv уравнения Эйлера-Гельмгольца и УРС.



Законы сохранения

Законы сохранения массы, количества движения, энергии, записанные в дифференциальной форме (1), предполагают **дифференцируемость функций** – течения без разрывов

В случае течений с разрывами необходимо использовать условия на разрывах (Гюгонио), следствия законов сохранения в интегральной форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{U} &= 0, \\ \rho \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \operatorname{grad} P - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \vec{S}_i}{\partial x_i} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \operatorname{div} ((\rho E + P) \vec{U} - \vec{q}) - \sum_{i,k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (S_{ik} U_{ik}) &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

При переходе к разностным уравнениям необходимы **специальные механизмы, описывающие диссипацию энергии на разрыве**

Виды разрывов: ударные волны, слабые разрывы в волнах разрежения, контактные разрывы, произвольные разрывы

Потеря дифференцируемости – источник погрешности

Однородные методы расчета ударных волн



Каждый сильный разрыв заменяется непрерывным течением в слое конечной ширины, в котором растет энтропия.

Известно 4 принципиально разных механизма моделирования диссипации энергии.

Год первой публикации	Авторы метода расчета	Страна	Механизм диссипации энергии
1950 г.	Д.Нейман, Р.Рихтмайер [1]	США	псевдовязкость
1954 г.	П.Лакс [2]	США	аппроксимационная вязкость
1957 г.	С.К.Годунов [3]	СССР	распад произв. разрыва
1960 г.	В.Ф.Куропатенко [4]	СССР	уравнения Гюгонио

1. Neumann J., Richtmayer R. A method for the numerical calculation of hydrodynamical shocks // J. Appl. Phys. –1950. – V.21, №3 – pp.232-237.
2. Lax P.D. Weak solution of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computations // Conn. Pure and Appl. Math. – 1954. – V.7 – pp.159-193.
3. Годунов С.К. Разностный метод расчета ударных волн // УМН –1957. –Т.12, вып.1. – С. 176-177.
4. Куропатенко В.Ф. Метод расчета ударных волн //ДАН СССР.– 1960. – В.3, №4. – С. 771-772.

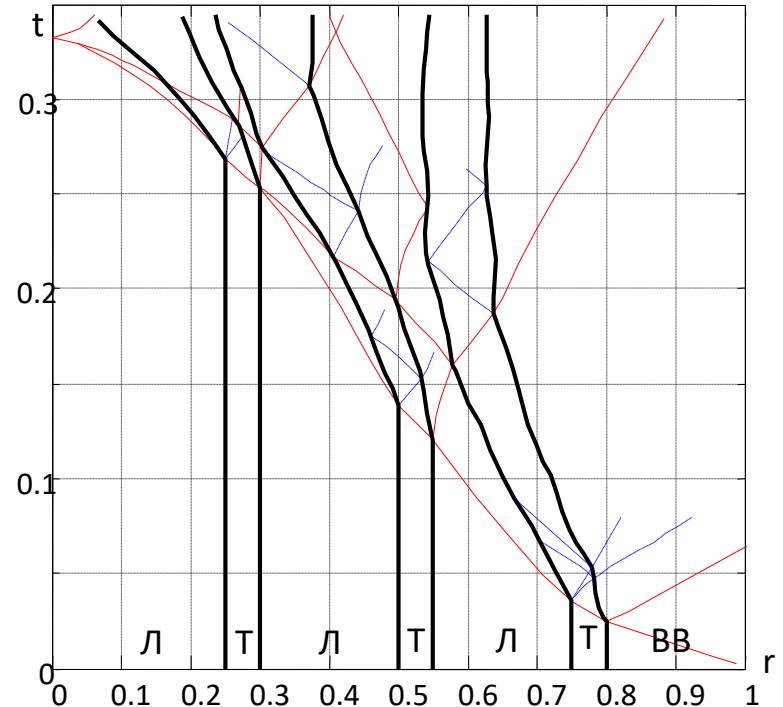
Исследование свойств разностных методов



Свойство	Нейман-Рихтмайер	Лакс	Годунов	Куропатенко
Условие устойчивости	$\kappa \leq \frac{\sqrt{\gamma}}{2k}$	$\kappa \leq 1$	$\kappa \leq 1$	$\kappa \leq 1$
Дистракция	$2k\sqrt{\frac{2}{\gamma+1}}$	$\frac{2(1-\kappa)}{\gamma+1} \left(\frac{\sqrt{V_0} + \sqrt{V_1}}{\sqrt{V_0} - \sqrt{V_1}} \right)$	$\frac{2(1-\kappa^2)}{\kappa(\gamma+1)} \left(\frac{\sqrt{V_0} + \sqrt{V_1}}{\sqrt{V_0} - \sqrt{V_1}} \right)$	
Монотонность на УВ	нет	есть всегда	есть всегда	условная
Эмпирические константы	есть, k	нет	нет	нет
Энтропия на гладких течениях	по критерию слабой УВ	растет	растет	постоянна

Неоднородный метод расчета УВ*

- Специальные алгоритмы расчета величин в окрестности разрывов
 - Условия на УВ
 - Условия на контактных разрывах
 - Условия на слабых разрывах
 - Распад произвольного разрыва
- Два вида сеток: пространственная и сетка особенностей



Картина сильных, слабых и контактных разрывов в переменных r , t в сферической многооболочечной конструкции после взрыва наружного слоя ВВ

*Куропатенко В.Ф. Приближенный метод расчета величин за фронтом ударной волны //Числ. методы механики сплошной среды. –1970. – Т.1, №6. –С. 77-83.

Свойства веществ. Уравнения состояния

Диапазон изменения – от твердого тела до плазмы

Фазовые переходы различных типов

Высокая точность описания свойств во всем диапазоне

Для описания фазовых переходов к уравнениям МСС и УРС добавляются кинетические уравнения.

Определяющие уравнения для упругости, пластичности и вязкости связывают компоненты девиаторов тензоров напряжений, деформаций и скоростей деформаций.

Уравнения состояния.

Подход В.Ф. Куропатенко^{1,2}

Удельная внутренняя энергия – сумма холодной (потенциальной) $E_x(V)$ и тепловой энергий $E_t(V, T)$

$E_x(V)$ разделяется на энергию потенциального взаимодействия атомов и энергию нулевых колебаний

$E_t(V, T)$ – сумма слагаемых, описывающих тепловое взаимодействие ядер и электронов

Давление $P = -\frac{dE_x}{dV} + f(V)T + T \int \frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial E_t}{\partial V} \right)_T dT.$

Составляющие $E_m(V, T)$

$$E_a = \frac{AT^n}{(\Theta(V) + T)^{n-1}}, \quad E_e = f(V)T^2 \frac{d\Omega(T)}{dT}, \quad E_{lum} = \frac{4\sigma T^4}{\rho c}$$

E_a соответствует теплоёмкости

$$c_v = \frac{AT^{n-1}(n\Theta(V) + T)}{(\Theta(V) + T)^n} \quad \text{—}$$

близка к теплоёмкости Дебая.

Функции $\theta(V)$, $f(V)$, $\Omega(T)$ подбираются из условий наилучшего описания экспериментальных данных по ударному сжатию, тепловому расширению $V(T)$ и зависимости $C_p(T)$ при $P=10^{-4}$ ГПа (используются методы оптимизации)

¹Куропатенко В.Ф. Модели механики сплошных сред // Челябинск, Челяб. гос. ун-т, 2007. – с. 92-145

²Куропатенко В.Ф. Уравнение состояния продуктов детонации плотных ВВ //ФГВ. –1989. – Т.25, №6. –С. 112-117

Фазовые переходы

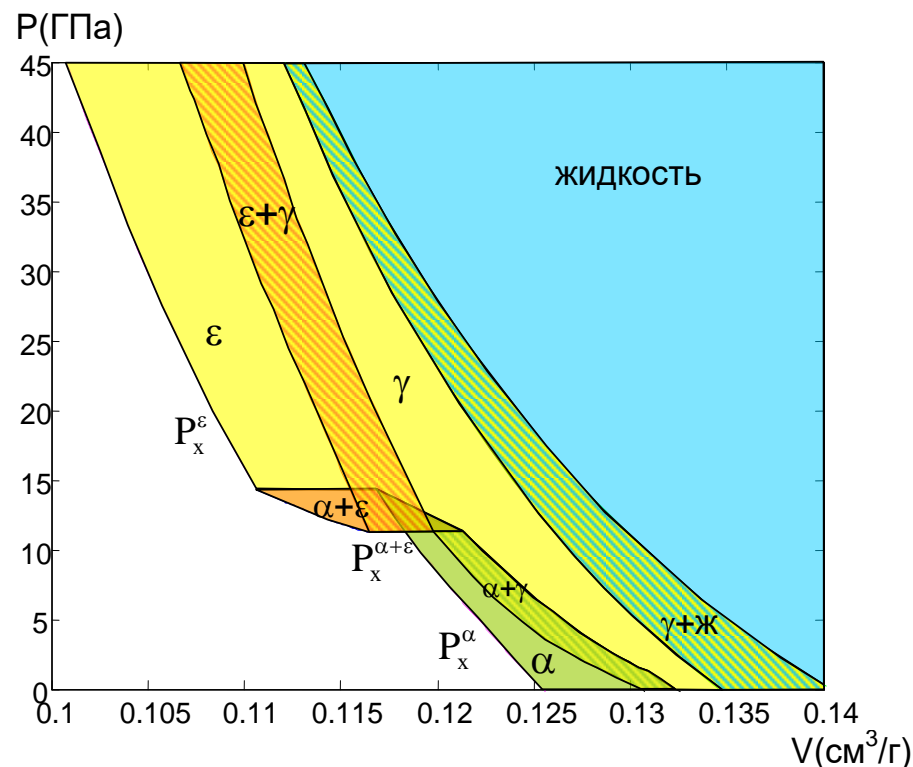
- Созданные УРС-ы моделируют: полиморфные переходы, плавление, испарение, диссоциацию, ионизацию.

Условия равновесия фаз:
непрерывность P , T и термодинамического потенциала $H = E + PV - TS$.

Границы между фазами:

- в переменных P , T – линии,
- в переменных P , V – области равновесной смеси фаз.

Созданы УРС металлов, горных пород, продуктов детонации ВВ



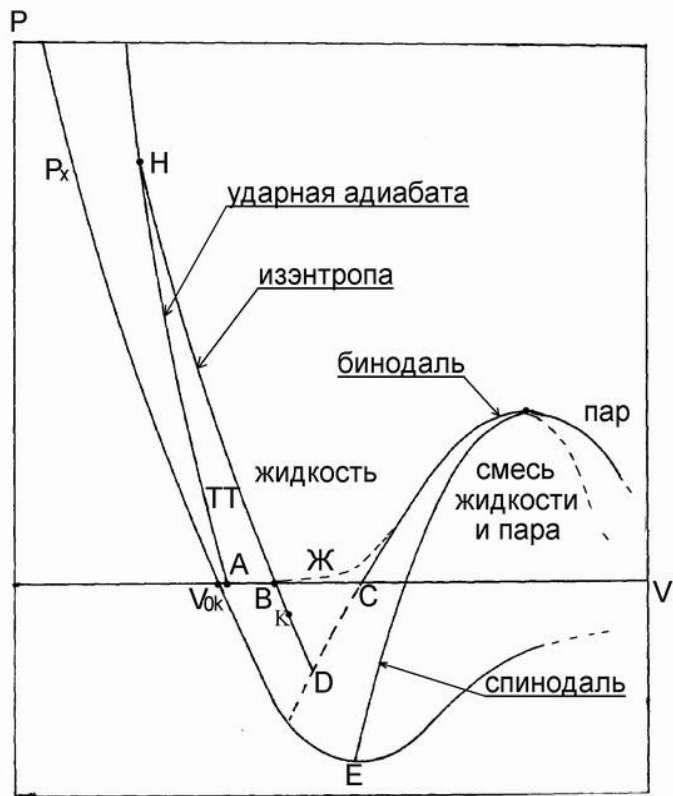
Уравнение состояния железа в плоскости P , V (Дремов В.В.)

Модель откольного разрушения

Состояние вещества в области, где $P < 0$, метастабильно.

Скорость роста микродефектов зависит от P , от расстояния до границы устойчивости и от концентрации микроповреждений.

Схема деформаций приведена на рисунке.



Ударная адиабата нагрузки АН – на ней вещество упрочняется.

Изэнтропа разгрузки НD. В области ВD $P < 0$, концентрация микроповрежденности растет. При значении $P=P_K$ микропоры сливаются в трещину и происходит фрагментация вещества (откольное разрушение).

При $\frac{dP}{dt} = -\infty$ разрушение происходит при $P_K=P_D$, при малых $\frac{dP}{dt}$ (статическая разгрузка) разрушение происходит при $P_D \ll P_K < 0$.

Аналитические решения

Для контроля точности применяемых методов расчета В.Ф. Куропатенко построен целый ряд аналитических решений^{1,2}:

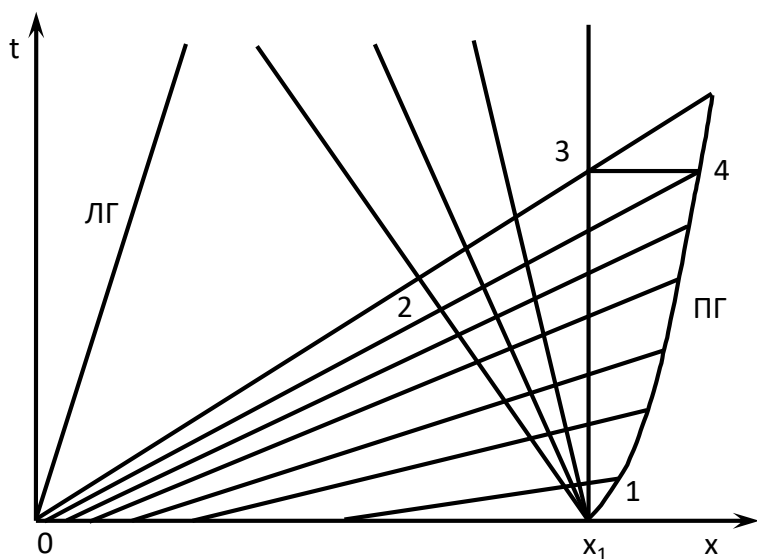
- сходящиеся к центру симметрии оболочки из сжимаемого конденсированного вещества,
- захлопывание сферически симметричных полостей в сжимаемом конденсированном веществе,
- взаимодействие волн разрежения, приводящее к откольному разрушению,
- выход ударной волны на свободную поверхность конденсированного сжимаемого вещества и движение свободной поверхности.

¹Куропатенко В.Ф. Коллапс сферического пузырька в идеальной сжимаемой жидкости // Тезисы VII Забабахинских научных чтений. – Снежинск, 2003 г

²Куропатенко В.Ф., Макеева И.Р. О точности расчетов откольного разрушения //Хим. физика. –2002. – Т.21, №9. –С. 72-78.

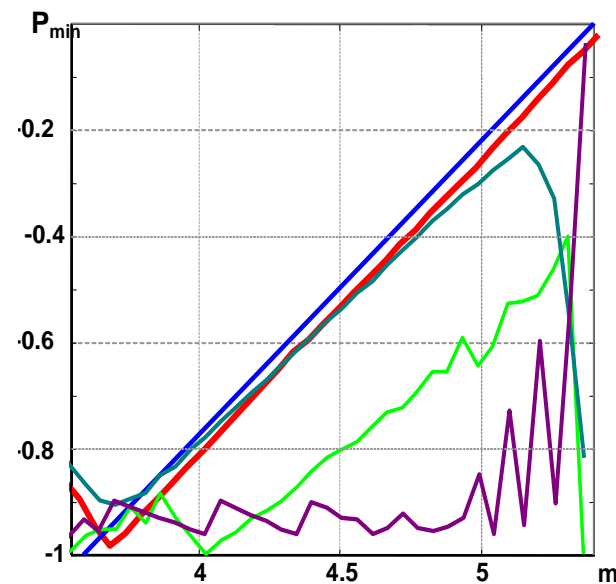
Выход УВ на свободную поверхность металла

Траектории разрывов в задаче о выходе УВ на свободную поверхность 1, 4



Откольное разрушение в одной точке 3, где $P = P_{кр}$.

Зависимость давления $P_{min}(m)$ на характеристике 1, 3 от массы вещества между нею и свободной границей 1, 4.



- аналитика,
- дивергентная РС Куропатенко,
- РС Годунова,
- РС Неймана-Рихтмайера,
- РС Лакса-Вендрофа.

Пути развития МСС

Чистых веществ в природе нет. **Все т.н. сплошные среды** в действительности **структурно неоднородны**.

Точность физических моделей вычислительной механики зависит от глубины учета структурных неоднородностей среды.

Пути развития:

- 1. Создание многоуровневых моделей, учитывающих свойства, проявляемые на каждом мезоуровне между микро- и макроуровнями.**
- 2. Создание уравнений состояния веществ, основанных на "первых принципах" и не содержащих эмпирических констант.**

Модель многокомпонентной среды

В.Ф. Куропатенко*

В случае идеальной среды без теплопроводности и хим. реакций законы сохранения i -го компонента имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla(\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k}(\alpha_i \rho_i \bar{U}_i U_{ik}) + \nabla \Pi_i - \bar{R}_i + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{F}_{ik}) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \varepsilon_i) + \nabla(\bar{U}_i (\Pi_i + \alpha_i \rho_i \varepsilon_i)) - W_i - \bar{R}_i \bar{U} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{F}_{ik} \bar{U}_i) + \nabla \bar{Q}_i = 0. \quad (3)$$

Они дополняются уравнениями $\varepsilon_i = E_i + 0,5 \bar{U}_i^2, \quad \Pi_i = \alpha_i P_i,$

уравнениями состояния $P_i = P_i(\rho_i, E_i), \quad T_i = T_i(\rho_i, E_i)$ и уравнениями для функций взаимодействия $W_i, \bar{R}_i, \bar{F}_{ik}, \bar{Q}_i$.

*Куропатенко В.Ф. Модель многокомпонентной среды //ДАН, –2005. – Т.403, №6. –С. 761-763.

Два типа взаимодействия

1. Парные взаимодействия. Обмен импульсом и энергией i -го компонента с каждым из остальных ($j=1,2,\dots,N$) определяется величинами

$$\bar{R}_i = \alpha_i \sum_{j=1}^N \alpha_j \frac{a_{ij} \rho_i \rho_j}{\tau_{ij}^u \rho} (\bar{U}_j - \bar{U}_i),$$

$$W_i = \alpha_i \sum_{j=1}^N \alpha_j \left(\frac{b_{ij}}{\tau_{ij}^p} (P_j - P_i) - \frac{c_{ij} (\rho_i C_{vi} + \rho_j C_{vj})}{\tau_{ij}^o} (T_j - T_i) \right).$$

Величины a_{ij} , b_{ij} , c_{ij} , τ_{ij}^u , τ_{ij}^p , τ_{ij}^T учитывают особенности взаимодействия i -го и j -го компонентов.

2. Кластерное взаимодействие. Оно описывается универсальными силами F_i и потоками энергии \bar{Q}_i

$$\bar{F}_{ik} = -0,5 \alpha_i \rho_i (\bar{U} - \bar{U}_i) (U_k - U_{ik}), \quad \bar{Q}_i = 0,5 \alpha_i (\bar{U} - \bar{U}_i) (P_i + \rho_i E_i).$$

Достоинства модели МКС

В.Ф. Куропатенко

Модель является многоскоростной, описывает всю совокупность неравновесных состояний смеси

Уравнения для смеси получаются суммированием уравнений для компонентов

Все независимые уравнения модели инвариантны к преобразованию Галилея

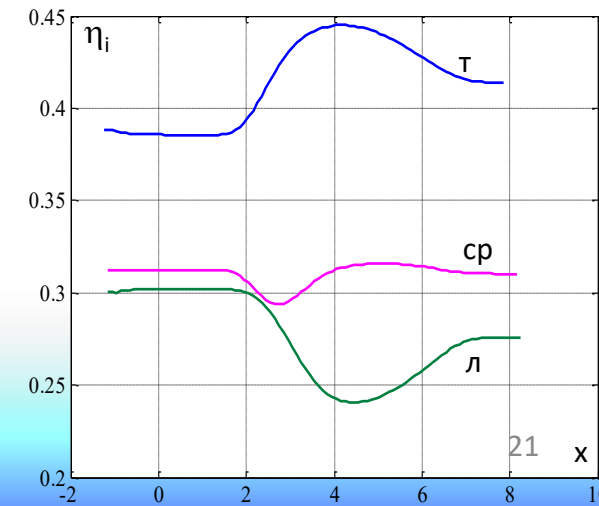
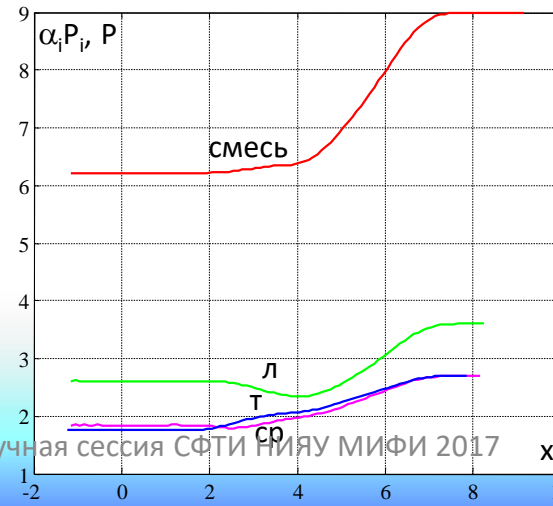
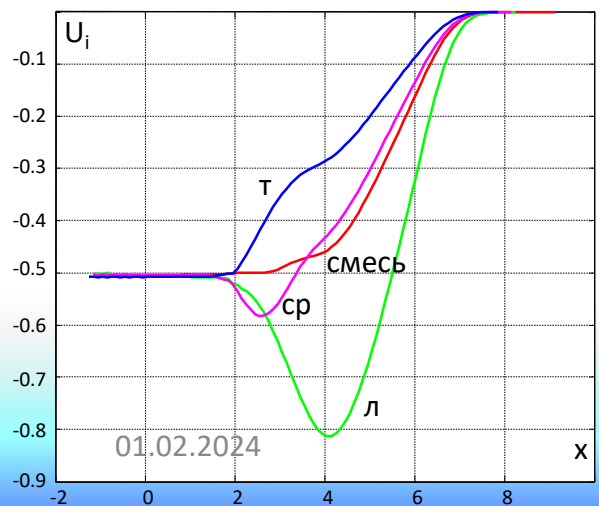
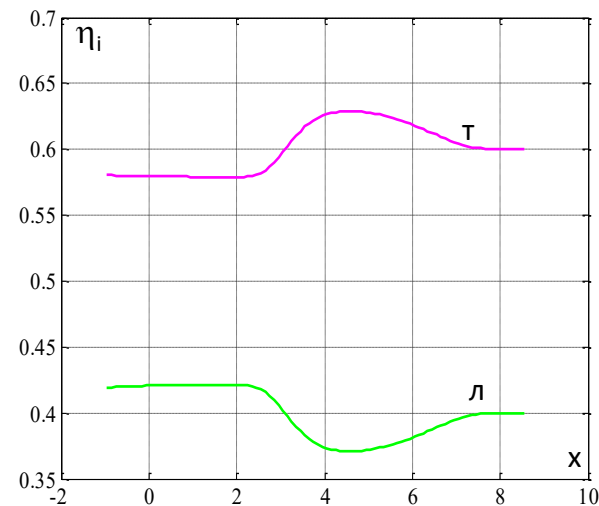
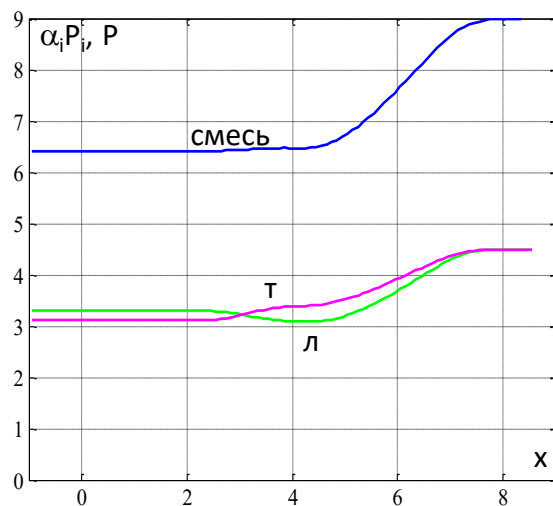
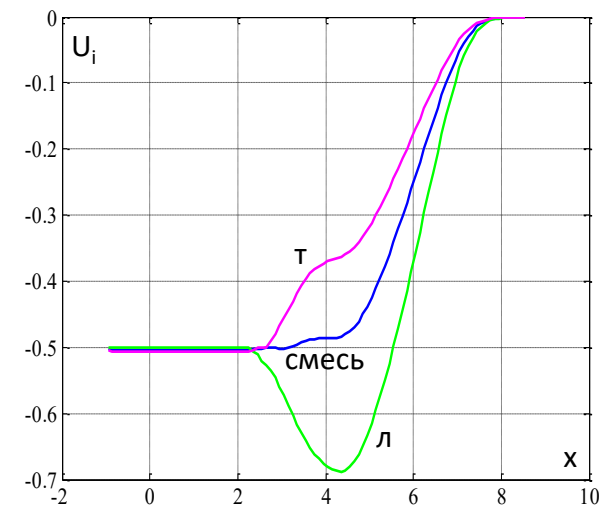
Уравнения состояния компонентов могут быть сколь угодно сложными

Новые силы и потоки энергии универсальны и не зависят от физических свойств или УРС компонентов

Диффузионные модели, уравнение фильтрации получаются в виде следствий из модели МКС

Волна разрежения в смеси газов

Проведены расчеты волны разгрузки в смеси идеальных газов. Задача 1 – два газа ($\alpha_{01}=\alpha_{02}$), задача 2 – три газа ($\alpha_{01}=\alpha_{02}=\alpha_{03}$). При $t > 0$ $U_{лг} = -0,5$. $\rho_{01}:\rho_{02}:\rho_{03}$ как аргон, криптон, ксенон.



01.02.2024

Научная сессия СФТИ НИЯУ МИФИ 2017

21

Особенности применения математических моделей

- **Любая модель является приближенной, тем более математическая модель.** Отсутствие указания на использованные гипотезы, упрощающие предположения, область применимости модели, информации о точности порождает формальный подход к интерпретации результатов расчетов.
- **Доступность ЭВМ** привела к массовому применению мат. моделирования массовым занятием. Освоив ЭВМ, легко ввести в неё любую «новую» модель. Подобрал значения эмпирических параметров, можно даже описать несколько экспериментов, но на этом пути нельзя получить средство для прогнозирования других экспериментов.

Все математические модели содержат эмпирические параметры, которые определяются не из теории, а из условия совпадения расчетов с базовым экспериментом. Конечная погрешность расчетов имеет вид:

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4 + \Delta_5 +$$

где

- Δ_1 - погрешность разностных уравнений
- Δ_2 - погрешность УРС,
- Δ_3 - погрешность определяющих уравнений,
- Δ_4 - погрешность состояния образца,
- Δ_5 - погрешность постановки расчета.

Источники погрешностей разностных уравнений

В результате применения однородных методов, «размазывающих» ударные волны и слабые разрывы, в решении возникают **энтропийные следы**:

- При взаимодействии сильных разрывов друг с другом,
- При взаимодействии сильных разрывов с контактными границами,
- При распространении разрывов по сетке с переменным шагом.

Энтропийные следы необратимы.

Взаимодействие последующих ударных волн с энтропийными следами полностью искажает распад произвольного разрыва. Конечная погрешность возрастает. Она не уменьшается при увеличении числа точек сетки.

Многие однородные методы сильно диссипативны, т.е. на непрерывных решениях энтропия меняется сильнее, чем на слабых ударных волнах.

$$T\Delta S = -\frac{1}{12} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_S \Delta V^3$$

Источники погрешности при моделировании фазовых переходов

- Сколь угодно сложное, широкодиапазонное многофазное уравнение состояния не гарантирует правильное описание поведения вещества в динамических условиях.
- Причина: фазовые переходы носят неравновесный характер. Скорость изменения концентраций фаз зависит от скорости нагружения.
- Эта скорость должна рассчитываться в прикладной программе с помощью кинетического уравнения, когда вещество пересекло границу фазы.
- Примерно 90% применяемых в МСС программных комплексов этого делать не умеют. Это очень распространенная причина конечных ошибок.

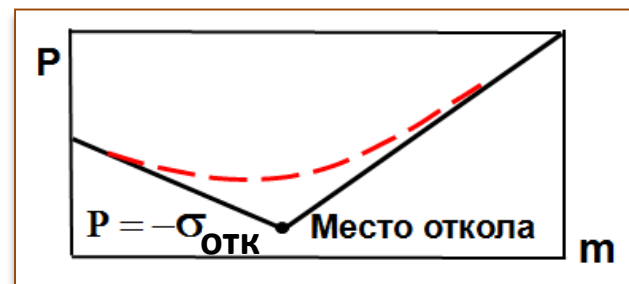
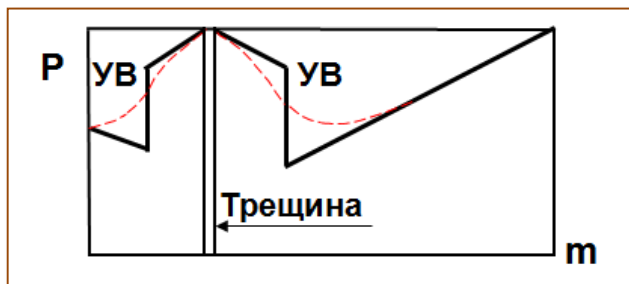
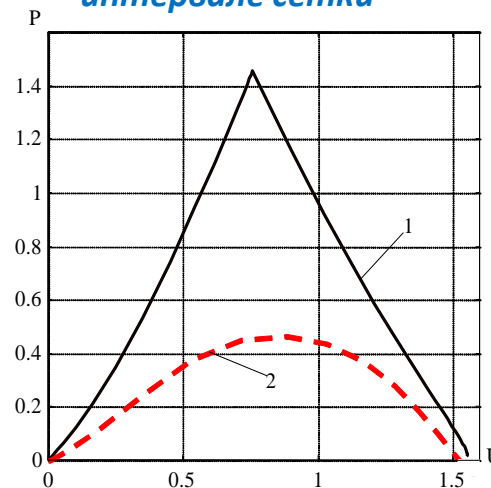
Погрешности при моделировании динамических процессов

Искажение формы импульса нагружения из-за свойств численного метода



Погрешность в определении положения трещин, моментов зарождения новой фазы, переключения режимов течения (упругое-пластическое, горение-детонация, воспламенение и т.п.)

Выход стационарной УВ на свободную поверхность.
Зависимость $P(U)$ в приграничном интервале сетки



— аналитика, --- расчет

Предельное, но не точное решение

Свойства разностной схемы проверяются на равномерных сетках.

Расчёты реальных систем проводятся на неравномерных сетках.

При $N \rightarrow \infty$ $h \rightarrow 0$ предельное решение может отличаться от точного.

Например:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_0 T^\alpha \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0.$$

При $t=0$ $T(x)=0$, при $t \geq 0$ на границе при $x=0$ $T(t) = \left(\frac{\alpha D_0^2 t}{K_0} \right)^{\frac{1}{\alpha}}.$

Точное решение $T(x,t) = \left(\frac{\alpha D_0}{K_0} (D_0 t - x) \right)^{\frac{1}{\alpha}}.$

Аппроксимируем исходное уравнение разностным уравнением

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_1 T^\alpha \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \omega(h) = 0,$$

где $K_1 = K_0 \frac{h_{i+1} + 2h_i + h_{i-1}}{4h_i}.$

Если сетка задана по геометрической прогрессии со знаменателем 2,

то $K_1 = \frac{9}{8} K_0$ и при $h \rightarrow 0$ интегральная погрешность равна примерно 6%.

Предельное решение

Бытует великое заблуждение:

*Если хочешь повысить точность расчетов,
увеличь число N точек сетки.*

В действительности предельное решение, получающееся при $N \rightarrow \infty$ всегда отличается от точного решения. При увеличении N результат приближается к предельному решению.

На Рис. изображена зависимость времени образования откола t_p в задаче об уединенном отколе от числа точек сетки N в расчете однородным методом.

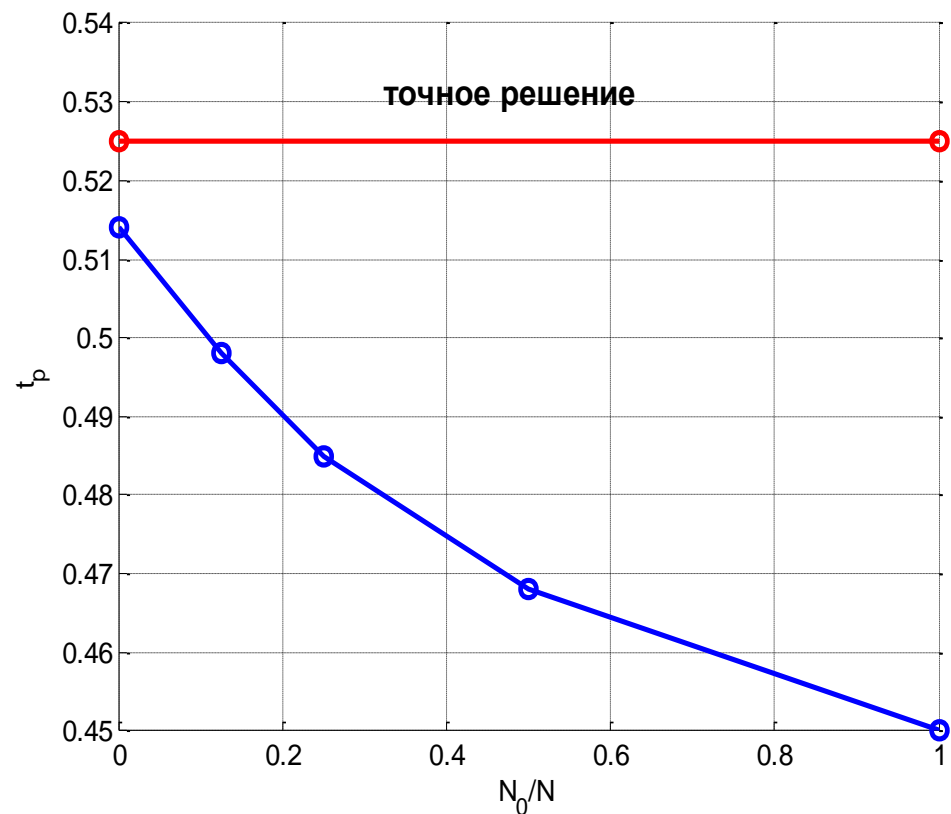


Рис. Сходимость t_p

Заключение

При математическом моделировании для адекватной оценки результатов необходимо понимать все особенности используемых моделей и методов

Работы В.Ф. Куропатенко в области математического моделирования сложных физических процессов – пример системного научного подхода к разработке и обоснованию математических моделей.

Разработанные им численные методы, модели поведения среды, уравнения состояния в течение полувека успешно используются в программных комплексах РФЯЦ-ВНИИТФ.



**Спасибо за
внимание!**

i.r.makeyeva@vniitf.ru