

## **Методы численного моделирования многомерных газодинамических течений, используемые во ВНИИЭФ.**

**Спиридонов В.Ф., Бахрах С.М., Величко С.В., Делов В.И.,  
Янилкин Ю.В., Соколов С.С., Бутнев О.И., Стенин А.М.,  
Змушко В.В., Воронин Б.Л., Быков А.Н.**

Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ, проспект Мира, 37, Саров,  
Нижегородская область, Россия

*Во введении приводится краткий обзор подходов к конструированию методов математического моделирования двумерных и трехмерных газодинамических течений, используемых во ВНИИЭФ. В основном тексте доклада более подробно излагаются основы конструирования регулярной лагранжево-эйлеровой методики ЛЭГАК, основанной на использовании метода концентраций для расчета газодинамических течений с большими деформациями контактных границ. Приводятся примеры численных расчетов ряда задач.*

### **Введение**

Областью применения разрабатываемых во ВНИИЭФ газодинамических методик является расчёт многомерных нестационарных течений неоднородной сплошной среды с учётом разнообразных физических процессов: газодинамики, упругопластичности, вязкости, детонации ВВ, лучистой теплопроводности и др.

Характерными особенностями моделируемых задач являются наличие в изучаемых системах многих физических веществ и большие деформации контактных границ.

Численное моделирование таких течений, особенно в трехмерном случае, как известно, сопряжено с большими трудностями. Эти трудности порождаются двумя противоречивыми требованиями к численным методикам: возможностью расчета течений с большими деформациями контактных границ в “безавостном” режиме (что особенно важно при проведении параллельных расчетов на кластерных

системах) и необходимостью обеспечения высокой (диктуемой конкретными прикладными задачами) точности расчетов.

Разнообразие подходов к преодолению этих трудностей, на основе компромисса между точностью и “безавстностью”, привело к созданию во ВНИИЭФ ряда различных конечно-разностных методов и методик, отличающихся типами используемых счетных сеток (регулярных, нерегулярных, лагранжевых, лагранжево-эйлеровых и эйлеровых) и методов выделения контактных границ.

Методики ДМК (Sofronov at al., 1984) и МЕДУЗА (Глаголева и др., 1972), базируются на использовании неструктурированных лагранжевых сеток. В методике МЕДУЗА существует возможность изменения топологии сетки в процессе решения задач (в том числе и в окрестности контактных границ) и соответствующего пересчета величин согласно конвективным потокам.

В регулярной лагранжевой методике Д (Дмитриев и др., 1979, Артемьев и др., 1989) используется локальная коррекция фрагментов лагранжевой сетки при больших деформациях средствами автоматического исправления “плохих” точек трёхмерной лагранжевой сетки и пересчета сеточных величин на исправленную сетку. При исправлении точек на границах раздела различных веществ используется методика расчета “смешанных” ячеек, основанная на введении адаптивных сеток в ячейках, содержащих несколько веществ.

В ряде методик ВНИИЭФ, использующих регулярную счетную сетку, часть (или все) контактных поверхностей со сложной топологией, или сильно деформируемых в процессе счета, рассчитываются на сетке, линии которой с ними не совпадают. Осуществляется это с помощью разработанного во ВНИИЭФ метода концентраций (Бахрах и др., 1981) для расчета появляющихся в этом случае так называемых “смешанных” ячеек. Такой подход используется в эйлеровых методиках ЭГАК (Бахрах и др., 1981) и ТРЭК (Yanilkin at al., 1997), лагранжево-эйлеровых методиках ЛЭГАК (Бахрах и др., 1984, Бахрах и др., 1999, Бахрах и др., 2003) и ЛЭГАК-3D (Бахрах и др., 2004), МИМОЗА (Софронов и др., 1989, Змушко и др., 1988), РАМЗЕС-КП (Воронин и др., 1988, Софронов и др., 1999). Реализация метода концентраций в перечисленных методиках отличается моделями и алгоритмами расчета “смешанных” ячеек на лагранжевом и эйлеровом (расчет конвективных потоков величин) этапах. Так, например, в методике Рамзес-КП используется алгоритм локализации контактной границы внутри счетной ячейки, предложенный Янгсом (1982). Алгоритмы, присущие методу концентраций, используются также и в нерегулярной методике МЕДУЗА. Кроме того, перечисленные методики отличаются топологией используемых регулярных сеток и конечно-разностными схемами.

Для повышения точности разностной аппроксимации конвективных потоков однородного вещества на эйлеровом этапе вычислений в методиках, использующих регулярную счетную сетку, широкое распространение получил метод РРМ (Wodward and Colella, 1984) и его модификации. Такой подход, в сочетании с методом концентраций в “смешанных” ячейках, используется в методиках ЭГАК, ТРЭК, ЛЭГАК, РАМЗЕС-КП. В методике МИМОЗА используется модифицированный метод предельной линейной реконструкции.

Среди подходов “подсеточного” описания контактных границ, развиваемых во ВНИИЭФ, следует назвать метод адаптивных дробных сеток, используемый, например, в методике ЭГАК++ (Yanilkin et al., 2000), и метод выделения контактных границ, не совпадающих с линиями регулярной счетной сетки – метод выделения контактных линий (ВКЛ (Стенин и др., 1998)), развиваемый в рамках методики ЛЭГАК. В методе адаптивных дробных сеток вводится более подробная (чем основная) счетная сетка в окрестности контактных границ. Метод выделения контактных границ (ВКЛ) как линий, движение которых рассчитывается особым образом, восходит к работам Ноха (1964). Точки, описывающие контактные границы, расположены независимо от точек счетной сетки.

Еще одним подходом к конструированию численных алгоритмов во ВНИИЭФ является реализация дискретного метода сглаженных частиц (методика SPH (Башуров и Патянина, 1998)).

В основной части доклада более подробно излагаются основы конструирования регулярной лагранжево-эйлеровой методики ЛЭГАК-3D (Бахрах, 2004), основанной на использовании метода концентраций для расчета газодинамических течений с большими деформациями контактных границ. Приводятся примеры численных расчетов ряда задач.

## **Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью**

### **Основы методики ЛЭГАК**

Методика ЛЭГАК (Бахрах, 1984) – это конечно разностная лагранжево-эйлерова методика, использующая регулярную сетку. В трехмерной геометрии это сетка, состоящая из выпуклых шестигранников.

В методике ЛЭГАК используются:

- лагранжево-эйлерова счетная сетка, которая частично увлекается веществом; при этом допускается, что поверхности счетной сетки могут, как совпадать, так и не совпадать с границами веществ; в последнем случае возникают ячейки сетки, содержащие несколько веществ, и вводятся в рассмотрение концентрации (Бахрах, 1999);
- непрерывное согласованное представление (Бахрах, 1988) для потоков массы, энергии, количества движения и других величин при аппроксимации конвективных членов исходной системы уравнений;
- донорно-акцепторный алгоритм (Бахрах, 1981, Бахрах, 1999) счета конвективных потоков для предотвращения счетной диффузии, который по полю концентраций веществ в окрестностях донорной ячейки

определяет какие вещества, и в каком отношении вытекают из ячейки, содержащей несколько веществ.

При построении разностной схемы используется система законов сохранения, записанная для произвольного элемента пространства  $\Omega$ , ограниченного поверхностью  $S$ :

$$\frac{dF}{dt} + \int_S G(\bar{u} - \bar{u}^*) d\bar{s} = - \int_{\Omega} H dv, \quad (1)$$

где вектора  $F$ ,  $G$ ,  $H$  имеют следующие компоненты

$$F(M, M\bar{u}, Me); G(\rho, \rho\bar{u}, \rho e);$$

$$H \{o, grad p + div \mathcal{K}, p div \bar{u} + sp(\mathcal{K} \mathcal{D})\};$$

$M = \rho v$  - масса, содержащаяся в элементе пространства  $\Omega$ ,

$P$  - давление, определяемое уравнением состояния среды  $p(\rho, e)$ ;

$\mathcal{D}$  - девиатор тензора скоростей деформаций;

$\mathcal{K}$  - девиатор тензора напряжений, определяемый законом Гука и условием текучести Мизеса;

$\bar{u}^*$  определяет закон движения поверхности  $S$ ;

остальные обозначения общепринятые.

Решение системы уравнения 1 осуществляется интегрированием по времени с привлечением метода расщепления (Ковеня и Яненко, 1981).

Для этого исходная система уравнения 1 разбивается на две вспомогательные.

Первая система – лагранжевый этап – получается в предположении, что поверхность  $S$  движется со скоростью вещества, т.е. на первом этапе решается система уравнений

$$\frac{dF^{(1)}}{dt} = - \int_{\omega} H dV. \quad (2)$$

На втором (эйлеровом) этапе предполагается, что вещество покоится и происходит движение поверхности  $S$ . Таким образом, система уравнений, которую необходимо решить на втором этапе, имеет вид

$$\frac{dF}{dt} + \int_S G^{(1)}(u^{(1)} - u^*) dS = 0. \quad (3)$$

В свою очередь при решении системы уравнения 2 используется метод расщепления по физическим процессам.

Разностные формулы для систем уравнения 2 и уравнения 3 являются обобщением на трехмерный случай соответствующих соотношений, принятых при расчете осесимметричных течений (Бахрах и др., 1984). При этом был учтен опыт построения разностных формул для расчета трехмерных нестационарных течений, накопленный при создании ряда других методик (Артемов и др., 1989, Yanilkin et al., 1997, Змушко и др., 1988, Софронов и др., 1999), разрабатываемых во ВНИИЭФ.

Как указывалось выше, в методике ЛЭГАК грани счетных ячеек (шестигранников) могут не совпадать с контактными границами веществ.

В этом случае возникают ячейки, содержащие несколько веществ (смешанные ячейки). В дополнение к величинам  $\vec{r}, \vec{u}, \rho, e, g, P$  вводятся следующие величины:

$\alpha_i = M_i / M$  - массовые и  $\beta_i = V_i / V$  - объемные концентрации компонентов;  $e_i$  - удельные (на единицу массы данного вещества) внутренние энергии, где  $M_i, V_i$  - масса и объем  $i$ -го вещества, содержащегося внутри счетной ячейки  $\omega$ . Каждое вещество имеет свое уравнение состояния  $P_i = P_i(\rho_i, e_i)$ .

Предполагается, что для каждого вещества, содержащегося внутри смешанной ячейки, изменение величин описывается уравнениями, аналогичными системе уравнения 2 на лагранжевом этапе и системе уравнения 3 на эйлеровом.

Для определения изменения плотностей компонентов на лагранжевом этапе предполагается, что

$$\text{div} \bar{u}_i = \text{div} \bar{u}. \quad (4)$$

В одномерном случае это предположение эквивалентно предположению о том, что скорость контактной границы, находящейся внутри счетной ячейки, определяется с помощью линейной интерполяции по скоростям в узлах сетки.

Правило для вычисления давления  $P$  в смешанной ячейке следует тогда из условия аддитивности удельных энергий и принятого способа аппроксимации уравнений энергий компонентов:

$$\rho_i = \alpha_i \rho / \beta_i \quad P = \sum_{i=1}^N \beta_i P_i(\rho_i, e_i), \quad (5)$$

где  $N$  – число веществ в смешанной ячейке,  $\rho_i$  - плотность  $i$ -го вещества.

Введение на эйлеровом этапе специального донорно-акцепторного алгоритма счета потоков из ячеек, содержащих несколько веществ (Бахрах и др., 1981), ограничивает счетную диффузию и позволяет локализовать не выделяемые явно контактные границы с точностью до одной счетной ячейки. Идею алгоритма, ограничивающего счетную диффузию, можно пояснить на следующем простом примере: из смешанной ячейки в чистую вытекает вначале вещество, которое содержится в чистой ячейке. В общем случае анализируется поле концентраций в окрестности донорной ячейки, содержащей несколько веществ, и на основании этого анализа определяется какое вещество, в какой пропорции и с какими скоростями вытекает из данной ячейки.

Разностная схема (двухслойная, явная) имеет первый порядок точности и является условно устойчивой с ограничением на шаг интегрирования по времени:  $\tau(\tilde{u} + c) < kh$ , где  $h$  – характерный линейный размер счетной ячейки,  $c$  – скорость звука,  $\tilde{u}$  - скорость движения сетки относительно вещества,  $k = 0.5$ .

### **Программная реализация методики ЛЭГАК-3D**

Базовые принципы программной реализации методики ЛЭГАК-3D совпадают с принципами реализации методики ЛЭГАК (Авдеев и др., 2001), предназначенной для расчета осесимметричных течений.

В методике ЛЭГАК-3D принята полистная организация данных. Одно из семейств поверхностей счетной сетки является плоскостями либо пересекающимися по одной прямой (ось системы), либо параллельными. Это семейство является эйлеровым, плоскости листов фиксированны. В листе счетная сетка строится по правилам, принятым в методике ЛЭГАК (Авдеев и др., 2001).

Плоскую структуру листов может нарушать модуль счета лагранжевой газодинамики. Плоская структура листов восстанавливается модулями корректировки сетки и пересчета величин. В связи с этим модули корректировки сетки и пересчета величин работают в два этапа.

На первом этапе производится проектирование точек в листы и пересчет величин, связанный с этим изменением счетной сетки (конвективные потоки через “межлистовые” грани шестигранников).

На втором этапе производится корректировка счетной сетки в листах и соответствующий пересчет величин (конвективные потоки через “внутрилистовые” грани шестигранников).

Типы счетных сеток в листах такие же, как и в методике ЛЭГАК.

Методика ЛЭГАК-3D позволяет рассчитывать нестационарные течения сплошной среды в лагранжево-эйлеровых переменных, что включает

- расчет нестационарных газодинамических течений;
- расчет упругопластических течений;
- расчет распространения волн детонации с постоянной скоростью и с учетом кинетики разложения взрывчатого вещества (ВВ);
- учет разрушения материалов.

Программы для расчета названных выше процессов реализованы в виде отдельных счетных модулей.

Программная реализация методики ЛЭГАК-3D, так же как и программная реализация методики ЛЭГАК, состоит из счетной и сервисной частей.

Счетная часть написана на языке фортран-90. Она функционирует как на ПК, так и на других вычислительных комплексах, поддерживающих язык фортран-90 и стандарт передачи сообщений MPI (MPI, 1994).

Сервисная часть, предназначенная для подготовки задач и обработки результатов, реализована как Windows-приложение, написана на языке C++, функционирует на ПК.

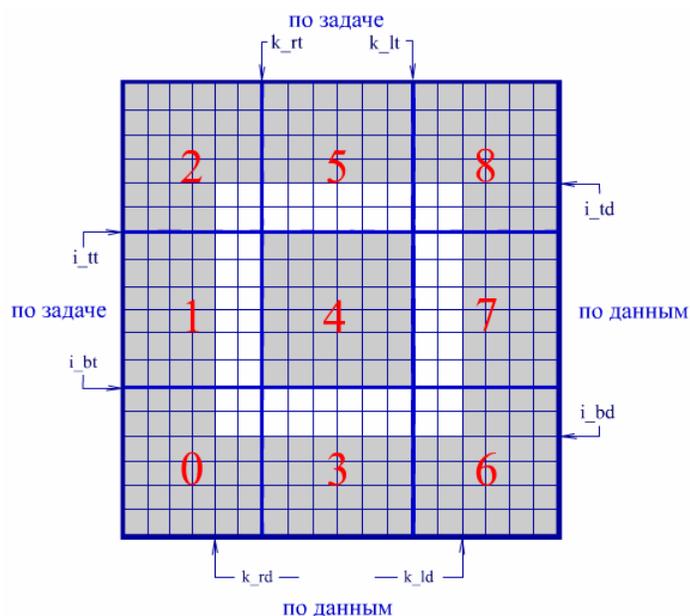
## **Распараллеливание методики ЛЭГАК-3D**

При выработке принципов и схемы распараллеливания методики ЛЭГАК-3D использовался опыт распараллеливания методики ЛЭГАК (Авдеев и др., 2001). Основные принципы распараллеливания при этом остались прежними:

- отсутствие программных ограничений на количество используемых процессоров (ограничение может возникать только из размеров конкретной рассчитываемой задачи);
- обеспечение возможности изменения количества процессоров в ходе решения задачи;
- независимость физических результатов расчетов от количества используемых процессоров (в том числе и одного при проведении расчета в скалярном режиме);
- переложение основной нагрузки, связанной с обеспечением расчетов в многопроцессорном режиме, на комплекс служебных подпрограмм;
- переносимость комплекса программ на различные вычислительные системы с распределенной памятью, поддерживающие стандарт передачи сообщений MPI;
- обеспечение распараллеливания счетных программ путем минимальных изменений в их текстах и организация работы в многопроцессорном режиме аналогично однопроцессорному.

Применяемая при распараллеливании методики ЛЭГАК-3D схема частично совпадает со схемой распараллеливания двумерной методики, но и имеет ряд существенных отличий.

При распараллеливании методики ЛЭГАК-3D используется *матричная* геометрическая декомпозиция задачи по процессам (с перекрытием или перехлестом). При этом счетный фрагмент для одного процессора – это несколько рядом расположенных ячеек счетной сетки по строкам и столбцам с полными данными по всем листам. На рисунке 1 показано разбиение задачи на 9 фрагментов ( $3 \times 3$  в листе).



**Рисунок 1.** Пример разбиения задачи на 9 фрагментов ( $3 \times 3$  в листе)

Тонкими линиями обозначены строки и столбцы перехлеста по данным. Скобками обозначена декомпозиция для фрагмента 4.

Каждый процессор рассчитывает свой фрагмент задачи, при этом на один из процессов возлагаются еще и функции управления и синхронизации.

Массивы величин, размеры которых зависят от числа строк и/или числа столбцов в задаче, подвергаются декомпозиции, и в оперативной памяти каждого процесса хранятся только нужные для этого процесса сечения этих массивов.

В методике ЛЭГАК-3D в основном (для большинства учитываемых физических процессов) используются явные конечно-разностные схемы. При этом для нахождения новых значений величин в ячейке необходимы значения нескольких ячеек по трем измерениям. Для расчета значений в граничных точках фрагмента нужно знать значения величин с соседних фрагментов. Размер *перехлеста* (по данным) по строкам и по столбцам в методике ЛЭГАК-3D равен 2. Для обеспечения адекватности декомпозированных данных по перехлестам у соседних фрагментов после работы счетных программ осуществляется межпроцессорный обмен данными в ячейках перехлеста.

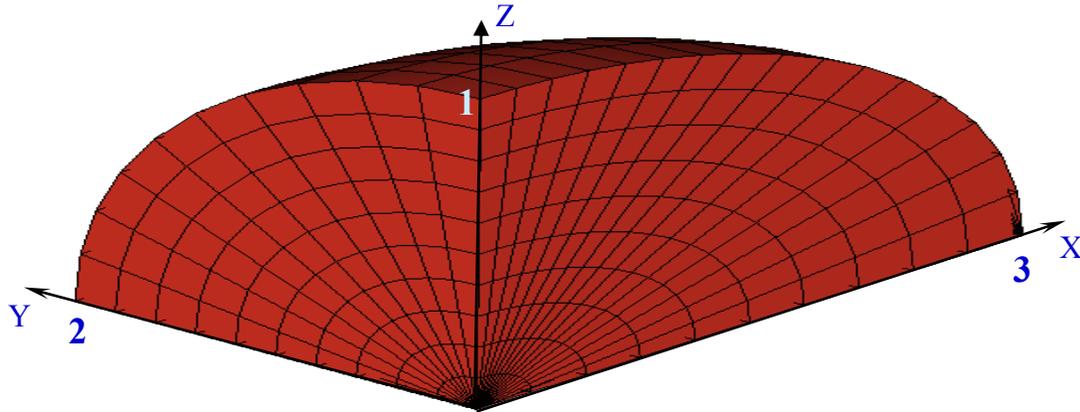
Для реализации указанных принципов созданы структуры данных и пакет сервисных подпрограмм.

### Примеры расчетов по методике ЛЭГАК-3D

Проведены ряд тестовых и методических расчетов, подтверждающих работоспособность методики ЛЭГАК-3D при расчете нестационарных течений сплошной среды. Ниже приводятся примеры некоторых расчетов.

**Задача 1. Адиабатический разлет газового эллипсоида.** Аналитическое решение этой задачи получено в работе (Немчинов, 1965).

Исходная геометрия представляет собой 1/8 часть от трехосного эллипсоида ( $x \geq 0, y \geq 0, z \geq 0$ ) с полуосями:  $a_x = 3, a_y = 2, a_z = 1$  (рисунок 2).



**Рисунок 2.** Трехосный эллипсоид. Область заполнена идеальным газом ( $\gamma = 7/5$ ).

Начальное распределение плотности и давления задается соотношениями:

$$P_0 = (1 - \eta^2)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}, \rho_0 = (1 - \eta^2)^{\frac{1}{\gamma-1}}. \text{ Здесь } \eta^2 = \frac{x^2}{a_x^2} + \frac{y^2}{a_y^2} + \frac{z^2}{a_z^2}.$$

Границы, лежащие на координатных плоскостях являются «жесткими» стенками. На внешней границе задано нулевое давление.

В таблице 1 приведены результаты расчетов на разном числе точек.

**Таблица 1. Результаты расчета задачи 1**

Сетка	$U_x$	$U_y$	$U_z$	$S_1 = \frac{a_y}{a_x}$	$S_2 = \frac{a_z}{a_y}$	$S_3 = \frac{a_z}{a_x}$
16*10*16	2.33	2.89	3.8	1.225	1.32	1.616
16*20*16	2.43	3.02	3.92	1.233	1.3	1.605
16*30*16	2.46	3.07	3.97	1.236	1.3	1.607
Асимп. решение	2.56	3.17	4.27	1.23	1.35	1.66

Здесь 16\*10\*16 означает разбиение на 16 столбцов, 10 строк и 16 листов и т.д.

По результатам расчетов видно удовлетворительное согласие между полученными значениями и асимптотическим решением. Причем, чем больше разбиение по направлению разлета, тем ближе численное решение приближается к асимптотическому.

**Задача 2. Развитие трехмерной неустойчивости Рихтмайера-Мешкова.**

Постановка задачи взята из работы (Змушко и др., 1988). Исходная область представляет собой параллелепипед высотой 0.4см и длинами сторон 1.5см,

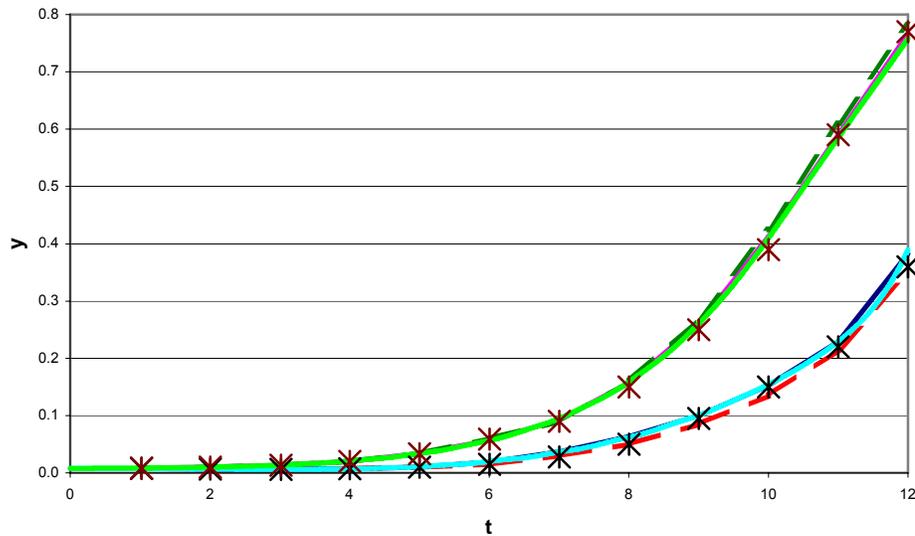
заполненный газом с уравнением состояния  $p = c_{36}^2(\rho - \rho_0)$ . На верхней грани задается постоянное давление  $P=1$ , нижняя грань является свободной поверхностью, а боковые грани – «жесткими стенками».

В начальный момент времени по всей области задается возмущение

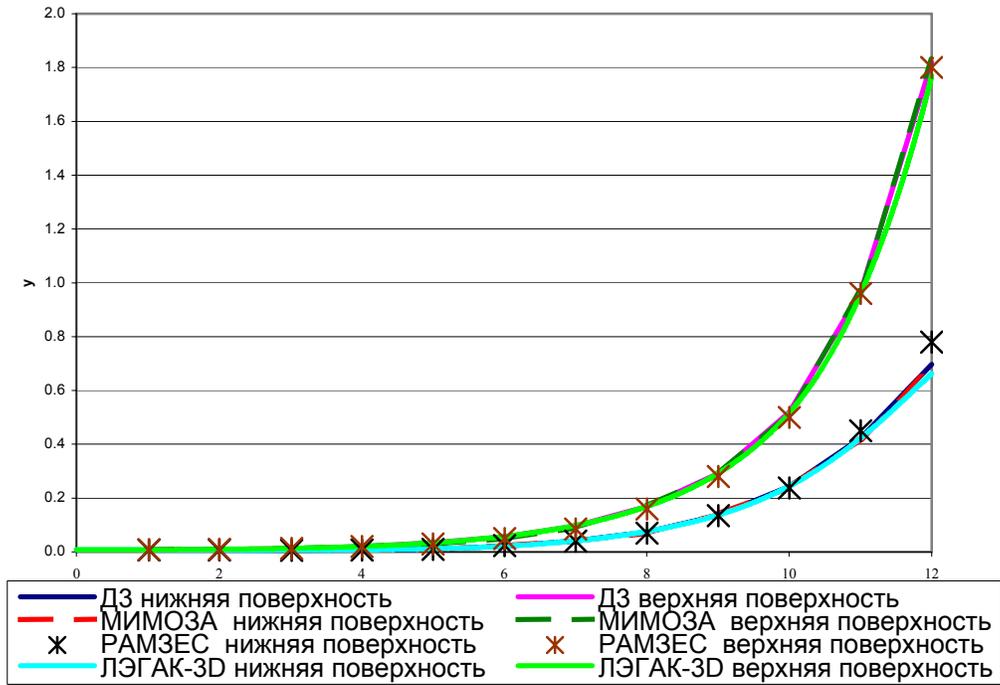
$$y = y_0 - A_0 \left( \cos \frac{\pi x}{l_1} + \cos \frac{\pi z}{l_2} \right).$$

Начальные параметры следующие:  $c_{36} = 1 \text{ км/с}$ ,  $l_1 = l_2 = 1.5 \text{ см}$ ,  $\rho_0 = 20 \text{ г/см}^3$ ,  $A_0 = 0.004 \text{ см}$ .

Расчет велся до момента времени  $t=12 \text{ мкс}$ . Счетная область разбивалась на 21 точку по направлениям  $OX$  и  $OZ$  и на 6 точек по направлению  $OY$ . Так как аналитического решения задача не имеет, сравнение проводилось с расчетами по другим методикам (Yanilkin at al., 1997, Бахрах и др., 1984, Бахрах и др., 1999, Бахрах и др., 2003, Бахрах и др., 2004). Результаты расчетов сравнивались по росту амплитуды возмущения в сечениях  $Z=0$  и  $Z=1.5$ . Эти кривые приведены на рисунке 3. Видно хорошее согласие с данными, полученными по другим методикам.



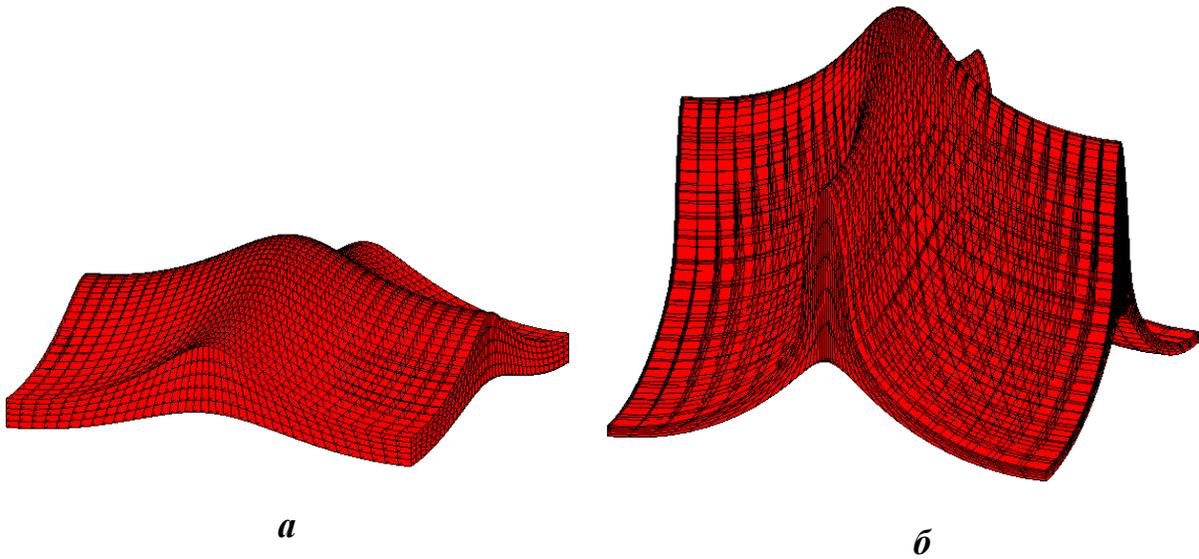
*a*



*б*

**Рисунок 3.** Задача 2. Расчетные зависимости амплитуды возмущения от времени:  $a - z=0$ ;  $б - z=1.5$ .

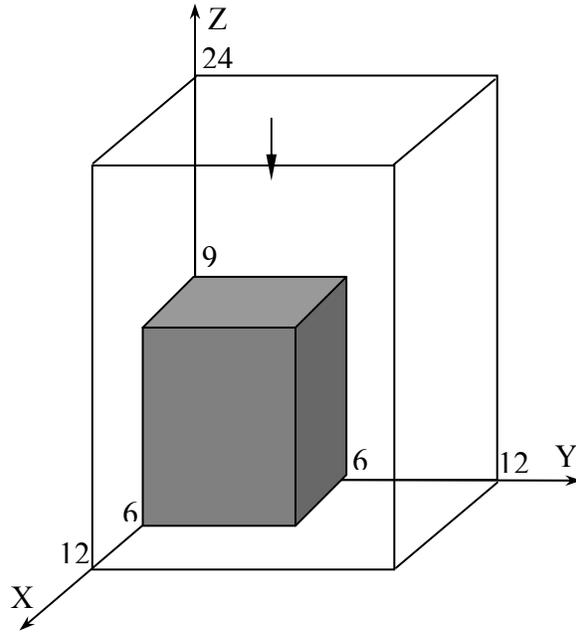
На рисунке 4 приведены расчетные области на моменты времени 10мкс и 12мкс.



**Рисунок 4.** Задача 2. Расчетная область:  $a - t=10\text{мкс}$ ;  $б - t=12\text{мкс}$ .

**Задача 3. Расчет неустойчивости Рихтмайера-Мешкова.** В трехмерной постановке расчет этой задачи впервые был проведен по методике МЕДУЗА (Барабанов и др., 2003).

В области  $0 \leq X \leq 12$  см,  $0 \leq Y \leq 6$  см,  $0 \leq Z \leq 24$  см находятся два идеальных газа: воздух с параметрами  $\rho = 0.001205$  г/см<sup>3</sup>,  $e = 0.2033195$  кДж/г,  $\gamma = 1.4$  и фреон с параметрами  $\rho = 0.00513$  г/см<sup>3</sup>,  $e = 0.1374339$  кДж/г,  $\gamma = 1.139$ . Фреон занимает область размерами  $0 \leq X \leq 6$  см,  $0 \leq Y \leq 6$  см,  $0 \leq Z \leq 9$  см. Начальная геометрия задачи представлена на рисунке 5. Все границы счетной области, кроме верхней, – жесткие стенки. На верхней границе области ( $z = 24$  см) задавалось давление  $P = 2.2148 \cdot 10^{-4}$  ГПа.



**Рисунок 5.** Начальная геометрия задачи.

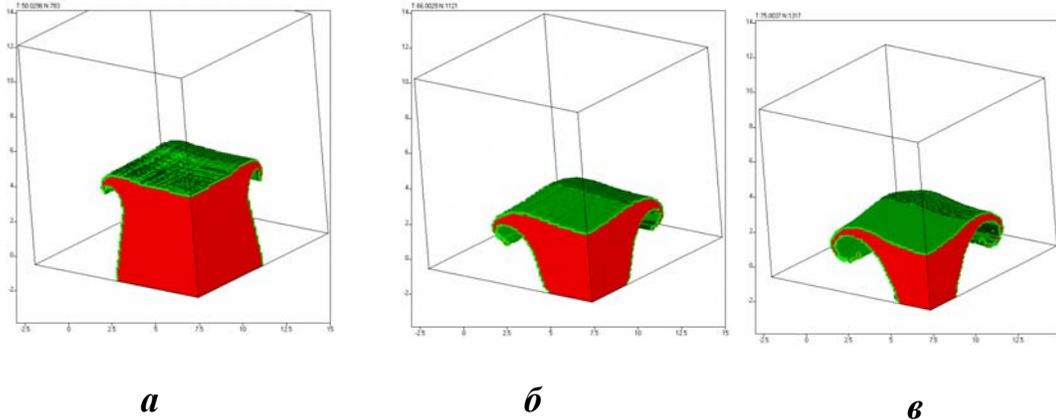
Начальная сетка разбивалась на 101 строку, 101 столбец и 101 лист по направлениям Z, X, Y соответственно. Листы счетной сетки располагались параллельно плоскости XOZ. Сетка в листах: в интервале  $0 \leq Z \leq 9$  см содержала 90, а в интервале  $9 \leq Z \leq 24$  см 10 строк. Сетка по столбцам и листам – равномерная по расстоянию.

Область  $0 \leq Z \leq 9$  см до момента времени  $t = 650$  мкс была неподвижной. После этого момента сетка во всей задаче поддерживалась равномерной по расстоянию. На рисунке 6 представлены сечения области плоскостями  $X=0$ ,  $Y=0$  и  $X=Y$  (диагональное сечение) на время  $t = 750$  мкс (сечение построено с использованием симметрии решения). На рисунке 7 представлено развитие неустойчивости на различные моменты времени.



**Рисунок 6.** Задача 3. Сечения области на момент времени  $t = 750$  мкс:

$a$  – плоскостью  $X=0$ ;  $b$  – плоскостью  $Y=0$ ;  $v$  – плоскостью  $X=Y$ .



**Рисунок 7.** Задача 3. Развитие неустойчивости на различные моменты времени: *a* –  $t=500\text{мкс}$ ; *б* –  $t=660\text{мкс}$ ; *в* –  $t=750\text{мкс}$ .

Результаты расчетов этой задачи по комплексу ЛЭГАК-3D согласуются с результатами расчетов, проведенных по комплексу Медуза-3D (Бахрах и др., 2004).

**Задача 4. Разгон и сжатие сферической оболочки слоем ВВ.** Начальная геометрия задачи с полем концентраций представлена на рисунке 8.

В области  $0 < r < 8.14\text{см}$  находится вакуум. Область  $8.14\text{см} < r < 8.8\text{см}$  - оболочка с уравнением состояния типа Ми-Грюнайзена с параметрами  $\rho_{00} = 7.82\text{г/см}^3$ ,  $\gamma = 3.5474$ ,  $c_0 = 4.9\text{км/с}$ ,  $n = 3$ . В области  $8.8\text{см} < r < 15\text{см}$  находится ВВ. Уравнение состояния ВВ и ПВ  $P = (\gamma - 1)\rho e$ ,  $\gamma = 3$ . В области  $15\text{см} < r < 30\text{см}$  находится вакуум.

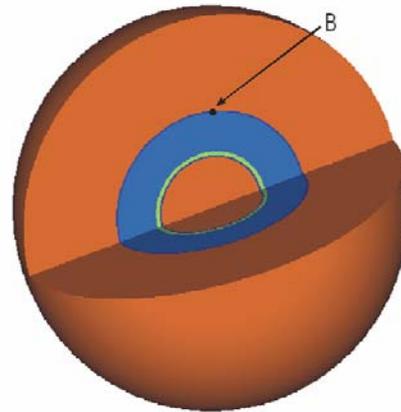
Начальные условия:

$$\rho_{\text{оболочки}} = 7.82\text{г/см}^3, \rho_{\text{ВВ}} = 1.67\text{г/см}^3.$$

$$E_{\text{обол}} = E_{\text{ВВ}} = U_{\text{обол}} = U_{\text{ВВ}} = 0$$

Параметры ВВ: калорийность  $Q=3.61\text{кДж/г}$ , скорость детонации  $D = 7.6\text{км/с}$ .

Инициирование детонации в точке с координатами  $x=0.0$ ,  $y=15.0\text{см}$ ,  $z=0.0$  (рисунок 10, точка В). Задача считалась до момента максимального сжатия оболочки.

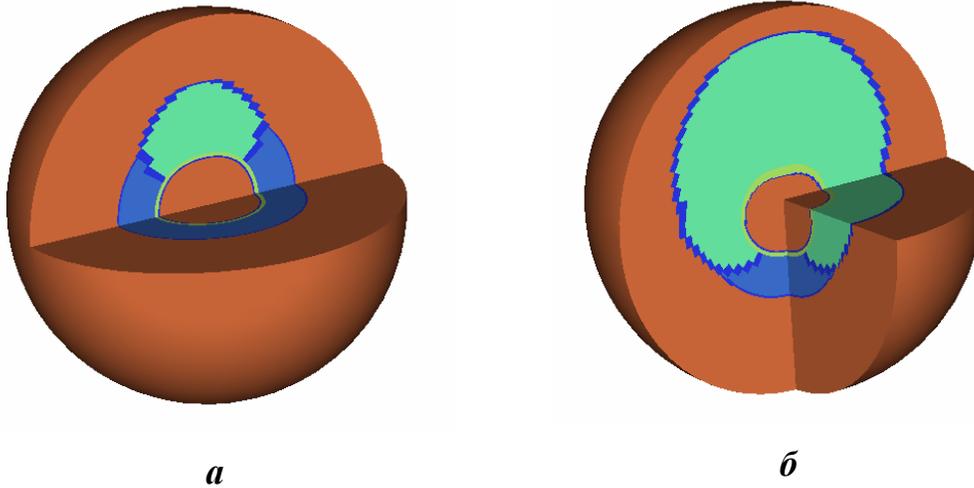


**Рисунок 8.** Начальная геометрия задачи 4.

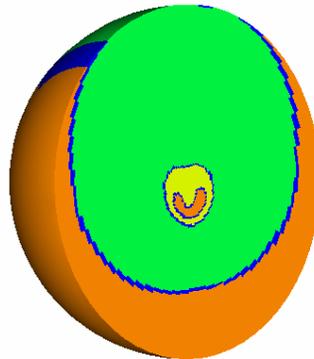
Счетная область разбита на 100 точек по строкам, 30 точек по столбцам, 60 точек по листам (полный разворот): на вакуум и оболочку 30 точек по радиусу, на ВВ и вакуум – 70 точек по радиусу равномерно по расстоянию. Тип интерполяции вдоль строк – равномерно по углу, вдоль столбцов - ВВ отделено от оболочки

лагранжевой линией, в остальных точках ставился тип - безитерационное равномерное разбиение. На рисунке 9 приведена картина развития волны детонации. На рисунке 10 показан фрагмент счетной области на время  $t=50$  мкс.

В ходе процесса происходит схлопывание оболочки, в какой-то момент достигается максимальное значение ее плотности. В расчетах фиксировался момент достижения и величина максимальной плотности оболочки.



**Рисунок 9.** Задача 4. Трехмерное сечение поля концентраций системы: *a* -  $t=15$  мкс; *б* -  $t=35$  мкс.



**Рисунок 10.** Задача 4. Фрагмент счетной области на момент времени  $t=50$  мкс.

Также была посчитана задача по методике ЛЭГАК-2D с иницированием на оси системы.

Результаты расчетов приведены в таблице 2.

**Таблица 2. Результаты расчета задачи.**

<b>Вид расчета</b>	<b>Время максимального обжата оболочки, (мкс)</b>	<b>Максимальная средняя плотность оболочки, (г/см<sup>3</sup>)</b>
<b>ЛЭГАК-2D</b>	60.8	8.93
<b>ЛЭГАК-3D</b>	60.3	8.82

## **Заключение**

Приведен краткий обзор подходов к конструированию методов математического моделирования двумерных и трехмерных газодинамических течений, используемых во ВНИИЭФ.

В качестве примера более детально изложена регулярная лагранжево-эйлерова методика ЛЭГАК-3D.

Методика ЛЭГАК-3D для расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды функционирует на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью.

Проведенные по методике ЛЭГАК-3D расчеты разных типов задач подтвердили ее работоспособность.

Расчеты, проведенные в многопроцессорном режиме, показали приемлемую эффективность распараллеливания комплекса. На матричной декомпозиции 10 строк, 10 столбцов и 100 листов эффективность составила 60% при использовании 100 процессоров.

Работы по более глубокому распараллеливанию (декомпозиция по третьему измерению) предполагается провести на следующем этапе разработки программной реализации методики ЛЭГАК-3D.

## **Благодарности**

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 05-01-00083).

## **Список использованных источников**

Sofronov I. D., Rasskasova V.V., Nesterenko L.V., “The Use of Nonregular Nets to Solving Two-Dimensional Nonstationary Problems in Gas Dynamics” Numerical Methods in Fluid Dynamics; ad Yanenko N.N. and Shokin Yu. I., M., Mir, 82-121 (1984).

Глаголева Ю.П., Жогов Б.М. Софронов И.Д. и др., “Основы методики Медуза численного расчета двумерных нестационарных задач газодинамики”, Численные методы механики сплошной среды. т.3, № 2, (1972).

- Дмитриев Н.А., Дмитриева Л.В., Малиновская Е.В., Софронов И. Д., “Методика расчета нестационарных двумерных задач газовой динамики в лагранжевых переменных”, В кн.: Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики, Под ред. Бабенко К.И.; М.: Наука, 175-200 (1979).
- Артемьев А.Ю., Делов В.И., Дмитриева Л.В., “Методика расчёта трёхмерных нестационарных задач газодинамики в переменных Лагранжа”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. Вып. 1, 30-39 (1989).
- Бахрах С.М., Глаголева Ю.Г., Самигулин М.С. и др., “Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций”, ДАН, т. 257, № 3, 257, № 3, 566-569 (1981).
- Yanilkin Yu.V., Tarasov V.I., Stadnik A.L. et al., “Program System TREK for Numerical Simulation of 3D Multi-component Medium Flows”, Proceedings of workshop "New Models and Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media", Oxford, 413-422 (1997).
- Бахрах С.М., Спиридонов В.Ф., Шанин А.А., “Метод расчета газодинамических течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых переменных”, ДАН СССР. т. 276, № 4, 429-433 (1984).
- Бахрах С.М., Спиридонов В.Ф., “Метод концентраций расчета нестационарных течений сплошной среды”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. Вып.4, 32-36 (1999).
- Бахрах С.М., Величко С.В., Спиридонов В.Ф., “Безавостная технология расчета течений сплошной среды по методике ЛЭГАК на многопроцессорных ЭВМ”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. Вып. 3, 14-21 (2003).
- 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. Вып.4, 41-50 (2004).
- Софронов И.Д., Афанасьева Е.А., Винокуров О.А., Воропинов А.И. и др., “Комплекс программ МИМОЗА для решения двумерных и трехмерных задач газовой динамики”, В сб. Научных трудов под ред. Г.П.Воскресенского, В.В.Забродина. Конструирование алгоритмов и решение задач математической физики. М., ИПМ АН СССР, 277-303 (1989).
- Змушко В.В., Плетенев Ф.А., Сараев В.А., Софронов И.Д., “Методика решения трехмерных уравнений газовой динамики в смешанных лагранжево-эйлеровых координатах”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. Вып. 1, 22-27 (1988).
- Воронин Б.Л., Скрышник С.И., Софронов И.Д., “Эйлерово-лагранжева методика численного решения трехмерных нестационарных задач газовой динамики с

- учетом теплопроводности”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. Вып.3, 3-8 (1988).
- Софронов И.Д., Воронин Б.Л., Скрыпник С.И., Быков А. Н., Козуб А.Г., “Методика и комплексы программ РАМЗЕС, РАМЗЕС-КП”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. Вып.4, 1999.
- Youngs D.L., “Time dependent Multi-material flow with large distortion”, Numerical Methods for Fluid Dynamics. Ed. By K.W. Morton and I.H. Baines. Academic Press. (1982).
- Yanilkin Yu.V., Belyaev S.P., Tarasov V.I. et al., “Adaptation of the EGAK code for numerical simulations of 2d flows with adaptive built-in refined computational mesh. –Physical model and code development for deflagration, deflagration-to-detonation transition and detonation of hydrogen containing mixtures”, ISTC- Project #436-97, Proceeding of the Project Meeting, held at the GRS, Cologne-Germany, May 17-19, (2000).
- Стенин А.М., Бондаренко Ю.А., Матвеев Ю.М., Сараев В.А., Трофимова Л.Я., “Методика расчета газодинамических течений с выделением контактных границ между веществами, не совпадающих с линиями сетки”, Харитоновские научные чтения. Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование». Тезисы докладов. Саров 23-27 марта 1998 г.; Саров, 23 (1998).
- Нох В.Ф., “СЭЛ – совместный эйлерово-лагранжев метод для расчета нестационарных двумерных задач” Сб. Вычислительные методы в гидродинамике. М., Мир, 128-184 (1967); Fundamental Methods in Hydrodynamics. v.3, Academic Press, (1964).
- Башуров В.В., Пятянина А.В., “Численный метод сглаженных частиц в трех мерной постановке для моделирования физических процессов на примере задач столкновений и пробивания”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. Вып.4, (1998).
- Бахрах С.М., Спиридонов В.Ф., “Схема согласованной аппроксимации потоков в методике ЛЭГАК”, Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. Вып. 4, 38-43 (1988).
- Ковеня В.В., Яненко Н.Н., “Метод расщепления в задачах газовой динамики”, Наука, Новосибирск, (1981).
- Барабанов Р.А., Бутнев О.И., Волков С.Г. и др., “Программа Медуза-3D расчета трехмерных задач газовой динамики на нерегулярных сетках. Расчеты неустойчивости Рихтмайера- Мешкова”. Сборник докладов Научно-технической конференции "Молодежь в науке". 13-18 (2003).
- Авдеев П.А., Артамонов М.В., Бахрах С.М. и др., “Комплекс программ ЛЭГАК для расчета нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и

принципы реализации комплекса на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью”, Вопросы атомной науки и техники, сер. Математическое моделирование физических процессов, Вып. 3, 14-18 (2001).

MPI: A Message Passing Interface Standart. Message Passing Interface Forum. March 22, (1994).

Немчинов И.В., “Разлет трехосного газового эллипсоида в регулярном режиме”, Прикладная математика и механика. Вып.1. 134-140 (1965).

Wodward P., Colella Ph., “The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks”, Journal of Computational Physics., v.54, № 1, 115-173 (1984).