

ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ (ИТМФ)

Главным направлением работ теоретических и математического подразделений ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ в последние годы является создание качественно новой расчетно-теоретической базы моделирования физических процессов в задачах механики сплошных сред, физики высоких плотностей энергии и других задачах, входящих в тематику основной деятельности Института.

Значительные успехи за прошедший год достигнуты в разработке и создании многомерных математических методик и программных комплексов нового поколения для эффективного компьютерного моделирования физических процессов на многопроцессорных ЭВМ с массовым параллелизмом на базе усовершенствованных физико-математических моделей. Создаваемые комплексы объединяют различные математические методы и методики в едином для них интерфейсе, используют единые для всех комплексов программные и аппаратные средства графического сервиса для подготовки данных, проведения расчетов, обработки и хранения результатов расчетов. В 2005 году:

- Создан и сдан в эксплуатацию комплекс программ, объединяющий возможности методик МИМОЗА и Д для расчета широкого класса двумерных и трехмерных задач механики сплошной среды на многопроцессорных ЭВМ.
- Создан и сдан в эксплуатацию комплекс программ ЛЭГАК-3D для двумерных и трехмерных расчетов в параллельном режиме процессов газовой динамики в лагранжево-эйлеровом приближении с учетом различных моделей упругопластического деформирования и кинетики детонации ВВ.
- Завершены работы по созданию нового комплекса САТУРН, предназначенного для численно-

го моделирования многомерных задач переноса в многогрупповом кинетическом приближении. Комплекс ориентирован на проведение расчетов многомерных задач переноса нейтронов, гамма-квантов и неравновесного рентгеновского излучения на большом числе процессоров современных ЭВМ, что значительно сократит сроки проведения расчетов. Организация комплекса позволяет оперативно развивать и внедрять в расчеты этих классов задач новые физико-математические модели и методики. Комплекс сдан в опытную эксплуатацию.

- Разработан проект многофункционального комплекса программ для расчета двумерных и трехмерных задач тепломассопереноса и анализа напряженно-деформированного состояния конструкций на высокопараллельных ЭВМ. Разработаны основные положения методики и базовые алгоритмы расчета уравнений Навье — Стокса и теплопереноса.
- Завершен важный этап по созданию комплекса для решения нестационарных двумерных и трехмерных нелинейных задач переноса энергии излучением, электронами и ионами с учетом неравновесности процессов взаимодействия:

- разработана численная схема и система поддержки параллельных вычислений для вакуумных областей, включая расчеты коэффициентов видимости;
- созданы параллельные версии основных счетных модулей комплекса.

Традиционно в ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ большое внимание уделяется совершенствованию и разработке новых физико-математических моделей, их адаптации и внедрению в математические методики, а также развитию и совершенствованию математических методик, ком-

плексов программ и их связей для совместного учета различных физических процессов при численном моделировании различных прикладных задач.

Основные результаты, полученные в 2005 году по этим направлениям:

- Создан связанный программный комплекс для расчета газодинамических процессов по методике ЛЭГАК с учетом вклада от нейтронов и гамма-квантов методом Монте-Карло. Этот комплекс в процессе счета использует спектральные константы взаимодействия нейтронов и гамма-квантов с веществом из библиотек ядерно-физических данных.
- Разработана методика для расчета двумерных течений разреженной плазмы в приближении многокомпонентной газодинамики. Реализована шестипотоковая модель плазмы. Проведены первые расчеты.
- Усовершенствована методика расчета одномерного движения в «многопотоковом» приближении разреженной плазмы в магнитном поле. В методику введена шестипотоковая модель.
- Разработана методика расчета трехмерных течений плазмы в нейтральной атмосфере с учетом геомагнитного поля. Проведены первые производственные расчеты.
- Создан программный комплекс для расчета методом Монте-Карло гамма-нейтронных изображений по результатам двумерных расчетов задач газодинамики и переноса частиц и излучения.
- Завершена работа над программой расчета в 1d3v-приближении (в кинетических уравнениях для плазмы оставлены одна пространственная координата и три скоростных координаты) взаимодействия лазерного излучения с бесстолкновитель-

ной плазмой. Выполнена ее калибровка на задачах, имеющих аналитическое решение, и на задачах, опубликованных в научной литературе. Совместно с сотрудниками ИЛФИ проведено численное исследование нескольких режимов взаимодействия мощного лазерного излучения фемтосекундной длительности с плазмой.

- Существенное развитие в методиках получила модель кинетики детонации взрывчатых веществ (МК):

- изучен и включен в модель алгоритм учета «медленных реакций», связанных с экзотермическим процессом роста углеродных кластеров за пределами зоны химической реакции, который позволяет точнее моделировать динамику разгона пластин и оболочек при контактном взрыве ВВ;

- уточнена зависимость увеличения ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ при снижении начальной плотности. На рисунке представлены экспериментальная рентгенограмма, полученная в ИФВ, и поле плотностей в расчете при инициировании детонации на расходящейся ударной волне в образце ВВ на основе ТАТБ с на-

чальной плотностью $1,875 \text{ г/см}^3$. В этих условиях образец с номинальной плотностью $1,91 \text{ г/см}^3$ не детонирует;

- проведена верификация модели МК для чувствительного взрывчатого состава на основе октогена и успешно рассчитан ряд производственных задач.

- Разработана методика численного моделирования динамики газожидкостных сред с выделением контактных границ и учетом диспергирования на неустойчивых границах жидкость-газ. Проведены методические расчеты по калибровке модели на характерных для задач Института течениях.

- Разработана методика и проведена серия расчетов задач молекулярно-динамического моделирования зарождения и развития микротрещин в кристаллических структурах при динамическом нагружении.

- Разработана и внедрена двумерная методика расчета смешанных ячеек в односкоростной гетерогенной среде (модель Рахматулина). Модель предполагает различную сжимаемость компонентов среды и описывает такие среды, как пена, газожидкостная и пузырьковая

среды, аэрозоль, пористые материалы. Эти среды характеризуются тем, что скорость звука в них меньше, чем скорость звука в отдельных компонентах.

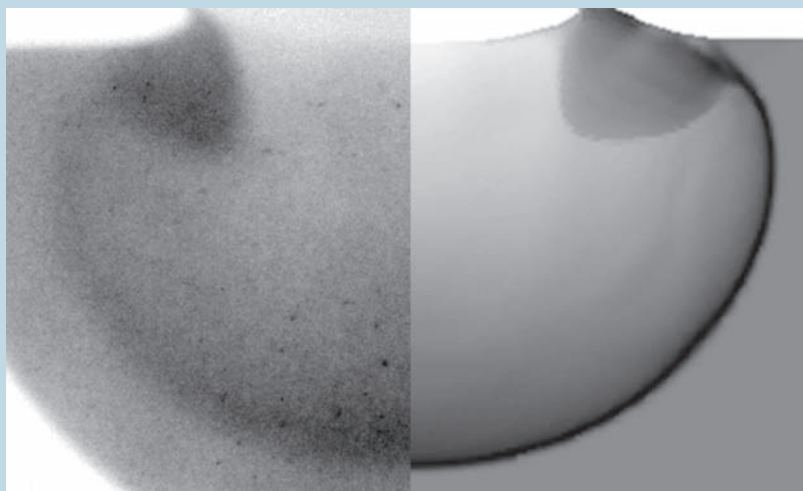
- В двумерном комплексе САТУРН реализована методика расчета процессов переноса быстрых заряженных частиц с учетом реакций «на лету». Методика внедрена в расчеты неравновесного энерговыделения.

- В комплексе САТУРН дополнительно реализованы разностные схемы: DS_n -схема (with Artificial Dissipation) с введением в уравнение переноса диссипативных членов и характеристическая схема (или схема типа характеристических трубок) — СТ-схема (Characteristic Tube scheme). По сравнению со схемами DS_n -метода новые схемы обладают лучшими монотонными свойствами. При этом по точности решения DS_n -схема не уступает схемам DS_n -метода.

- В плане усовершенствования моделей уравнений состояния (УРС) веществ с целью расширения их области применимости и повышения точности описания экспериментальных данных:

- модифицирована модель РОСА-М, расширяющая области применимости по температуре и плотности. Получена модель для использования в полуэмпирических УРС металлов;

- разработана методика построения широкодиапазонных УРС с использованием сшивки УРС, предназначенных для описания поведения веществ в разных областях. При этом для полученного уравнения выполняются условия термодинамической согласованности. Работоспособность методики проиллюстрирована на примере построения широкодиапазонного УРС урана, для которого в качестве исходных выбраны УРС РОСА-М и УРС, полученный по модели Томаса — Ферми с поправками Копышева (ТФПК);



Эксперимент

Расчет

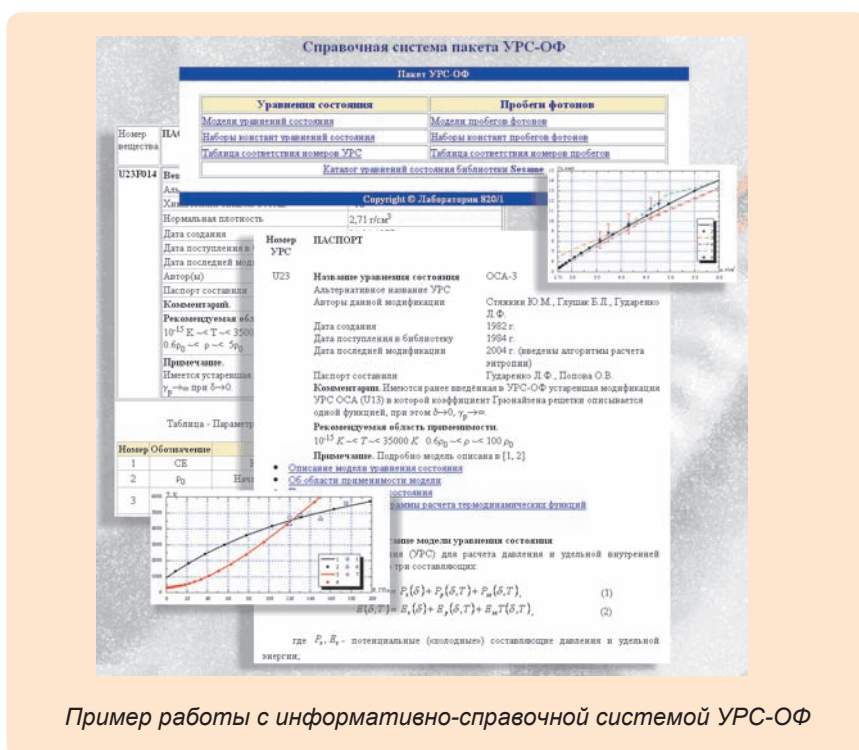
Поле плотностей в эксперименте и расчете: светлая область — продукты взрыва, более темная — зона невыгоревшего ВВ

— реализованы современные технологии управления информацией в интерактивной справочной системе пакета УРС-ОФ (единый пакет уравнений состояния и пробегов веществ), что позволило формализовать процедуру наполнения базы данных и уменьшить вероятность ошибок.

Среди новых математических методов и алгоритмов, повышающих точность и технологичность расчетов при математическом моделировании:

- метод численного решения двумерного нелинейного уравнения теплопроводности на комбинированных расчетных сетках (структурируемых и неструктурируемых). Метод позволяет проводить расчеты задач со сложной геометрией с одновременным использованием регулярного метода на структурируемых расчетных сетках и нерегулярного метода на неструктурируемых расчетных сетках. Как показали результаты тестирования, метод обеспечивает хорошую точность расчетов и является «безавстным»;

- новый алгоритм монотонизации DS_n^L схемы при решении

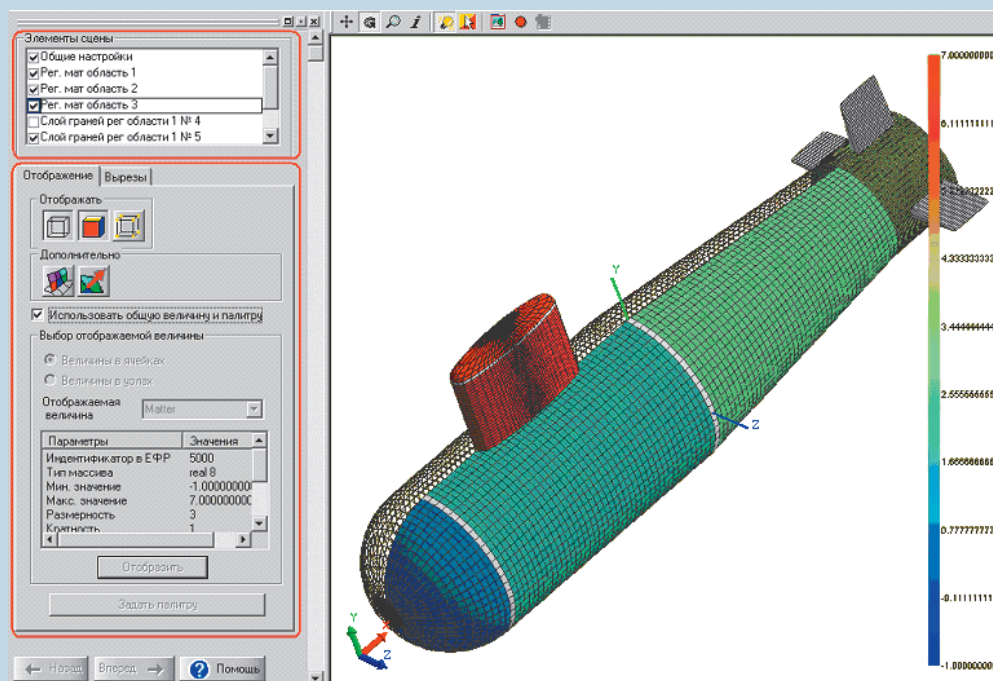


Пример работы с информативно-справочной системой УРС-ОФ

стационарного кинетического уравнения переноса в сферически-симметричной геометрии. Алгоритм в каждой фазовой ячейке и соседних ячейках по радиусу и направлению полета частиц строит поведение монотонизируемой функции на основе поведения решения, найденного

по схеме 1-го порядка точности. Расчеты модельных задач показали качественное превосходство предложенного алгоритма монотонизации по сравнению с широко используемым методом балансного зануления.

Разработаны и реализованы методы решения линейных



Задание информации о параметрах расчета начальных данных

систем алгебраических уравнений в параллельном режиме, ориентированные на многомерную пространственную декомпозицию задач моделирования. Усовершенствованы параллельные алгоритмы предобуславливания на базе неполного LU-разложения и перенумерации неизвестных. Все эти методы интегрированы в единую библиотеку PMLP/Parsol, которая пополнена естественным для параллельных прикладных программных комплексов интерфейсом, повышающим удобство пользования.

Завершен важный этап в работах по созданию единых для всех методик и программных комплексов средств графического задания начальных данных для расчетов. Разработана и сдана в эксплуатацию первая версия программы 3D-РНД для расчета начальных данных трехмерных задач математической физики. При задании начальных данных необходимо пройти ряд этапов: задать геометрию рассматриваемой системы, информацию о физических свойствах веществ, выбрать тип и параметры пространственной сетки, рассчитать распределение веществ и других величин по сетке.

В программе 3D-РНД реализован интерфейс импорта данных о геометрии из современных пакетов геометрического моделирования. Такой подход позволяет пользователям самим проводить задание геометрии в одном из таких пакетов, а также использовать данные, получаемые из конструкторских бюро.

Этапы задания информации о свойствах веществ, типе и свойствах трехмерной сетки, параметрах расчета начальных данных и особенностях конкретного прикладного комплекса, для которого рассчитываются данные, реализованы в программе 3D-РНД в виде графического интерфейса, в котором пользователь не только задает информацию, но и интерактивно контролирует

правильность результатов расчета. В зависимости от объема рассчитываемых данных расчет сетки и распределения вещества по сетке может вестись как в последовательном режиме на ПЭВМ, так и в параллельном режиме на многопроцессорном кластере.

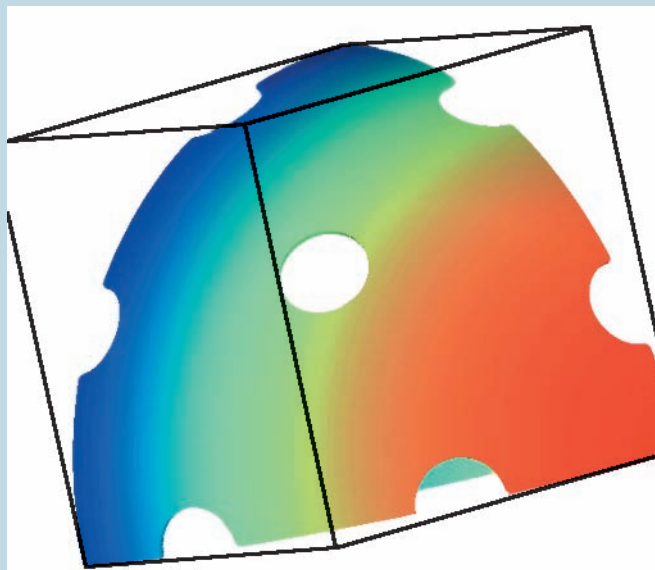
На сегодняшний день в программе 3D-РНД учтено и реализовано большинство требований прикладных комплексов, проводящих расчеты на регулярной трехмерной сетке. Ведется разработка алгоритмов построения нерегулярных сеток и расчетов начальных данных на них.

С использованием усовершенствованных физико-математических моделей, численных методов и программных комплексов получены новые расчетно-теоретические результаты.

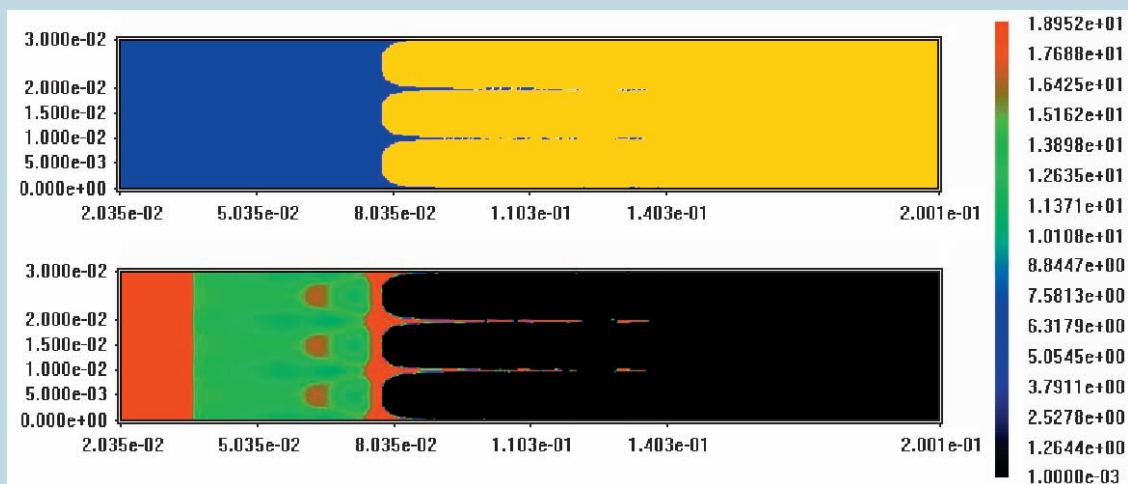
Проведено исследование оптических свойств лазерной плазмы, образующейся при облучении сферических лазерных мишеней. Описаны результаты исследования спектральных характеристик излучения светящегося плазменного образования (СПО), возникающего за фронтом ударной волны, распространяющейся в фоновом газе

с давлением 1 торр при лазерном облучении сферической мишени из органики на стенде МКВ-4 установки «Искра-5». Результаты эксперимента сравниваются с расчетами, проведенными с помощью методики СНДП. Эта методика помимо газодинамики и переноса излучения использует модель среднего иона для расчета кинетики ионизации, населенностей возбужденных уровней и учитывает неравновесные эффекты при расчетах как уравнения состояния, так и спектральных коэффициентов.

В опытах на установке МКВ-4 расчетно исследованы оптические свойства неравновесной плазмы. С помощью методики СНДП, включающей k - ϵ модель турбулентности, проведено исследование параметров светящихся плазменных образований, возникающих за фронтом ударной волны, распространяющейся в фоновом газе с давлением $p_0 = 6$ торр, при лазерном облучении с использованием более мощного, чем в предыдущих исследованиях, лазерного импульса и полых сферических мишеней. Результаты расчетов сравниваются с измерениями в опытах.



Построение расчетной сетки и задание начальных данных в пакете 3D-РНД для трехмерных задач математической физики



Типичная форма струйного развития неустойчивости на свободной искривленной поверхности конденсированного материала (расчет)

Дальнейшее развитие получил разработанный в ИТМФ комплекс программ НИМФА для решения трехмерных задач миграции подземных вод и распространения растворимых загрязнений в подземных водах от типовых локальных источников. Комплекс активно используется для решения задач

- обеспечения экологической безопасности при взрывных подземных экспериментах;
- прогнозирования последствий аварий в местах хранения радиоактивных отходов;
- экологии.

С использованием комплекса НИМФА проведена комплексная экологическая экспертиза бассейна реки Сатис.

Разработана расчетно-теоретическая модель, описывающая начальную стадию развития неустойчивости на искривленной свободной поверхности конденсированного материала при выходе на эту поверхность ударной волны.

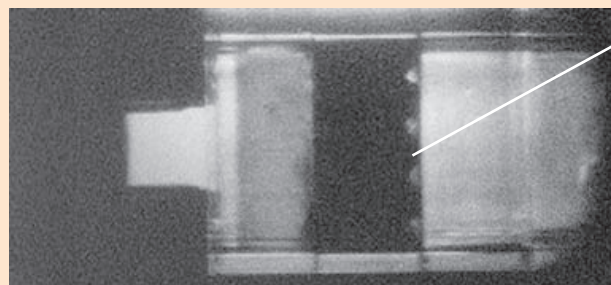
Установлено, что процесс роста неустойчивости при определенных условиях имеет кумулятивный характер, отличный от классической неустойчивости Рихтмайера — Мешкова. Свойства образующихся со свободной поверхности струй зависят от геометрии первоначальных

возмущений и реологических свойств материала. Получены основные закономерности, описывающие динамику роста такой кумулятивной неустойчивости в зависимости от начальных условий и свойств материала.

Ранее в экспериментах на образцах из алюминиевого сплава была показана возможность струйного развития неустойчивости на границе. Недавно совместно с ИФВ проведена новая

серия экспериментов, в которых подтверждаются некоторые результаты построенной теории развития кумулятивной неустойчивости со свободной поверхности конденсированных тел.

Рост производительности и памяти вычислительных комплексов позволил существенно продвинуться в работе по прямому численному моделированию турбулентного перемешивания. Задача о формировании турбу-



Начальная форма искривленной свободной поверхности



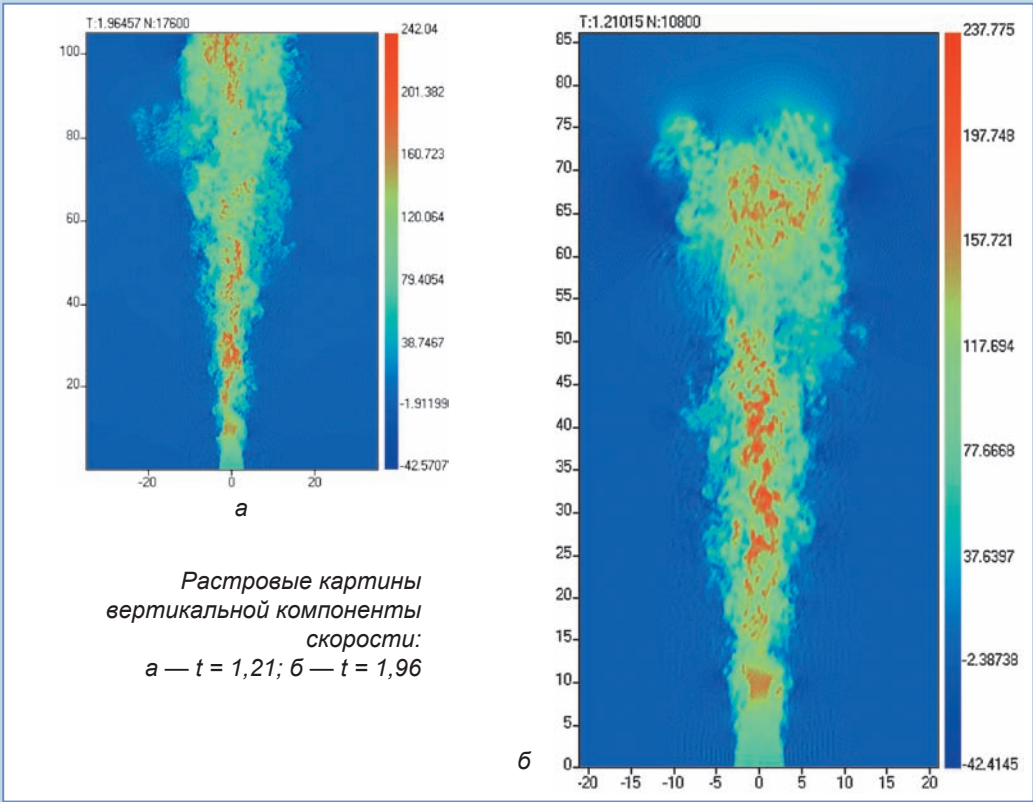
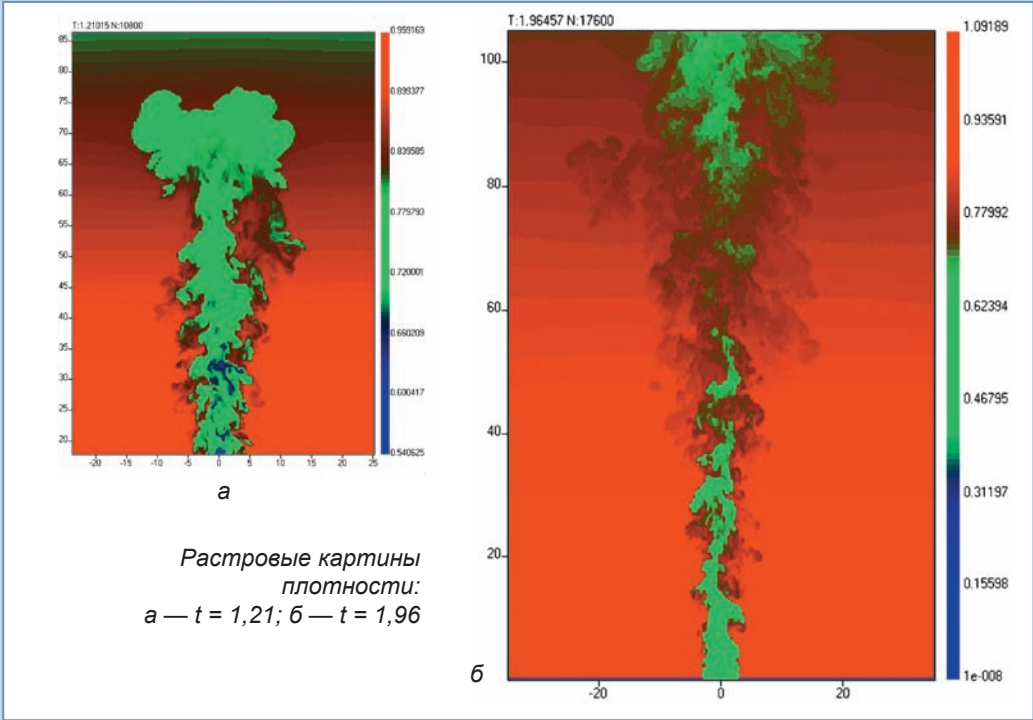
Струи

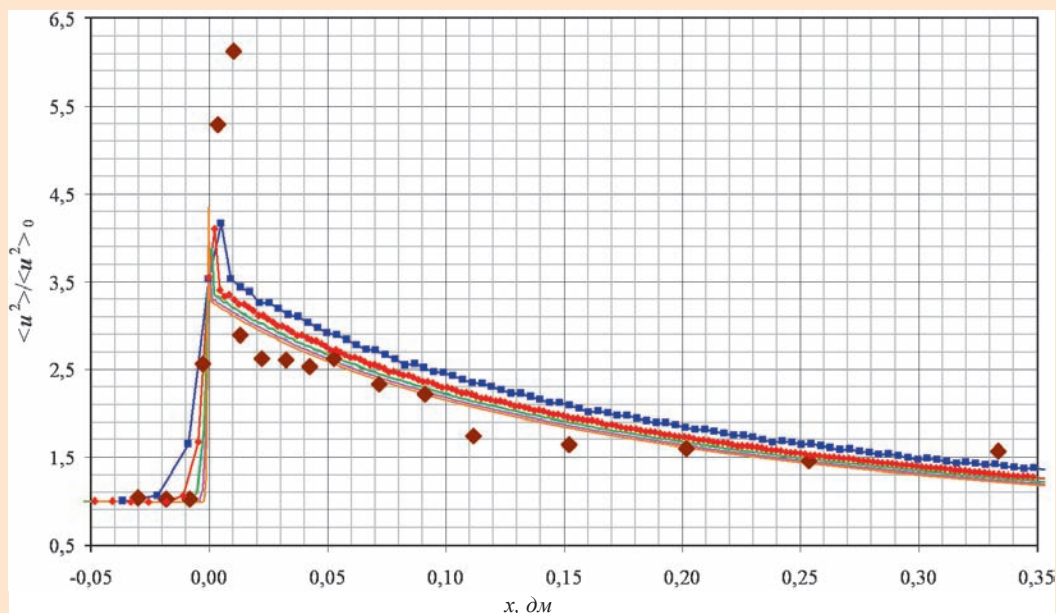
Типичная форма струйного развития неустойчивости на свободной искривленной поверхности конденсированного материала после выхода на эту поверхность ударной волны (эксперимент ИФВ)

лентной плавучей струи связана как с естественными точечными тепловыми источниками, так и с промышленными, возникающими, в частности, в результате аварийных ситуаций. Проведение

но прямое 3D численное моделирование развития такой струи от стационарного источника. Для прямого численного моделирования турбулентности на основе разностного решения

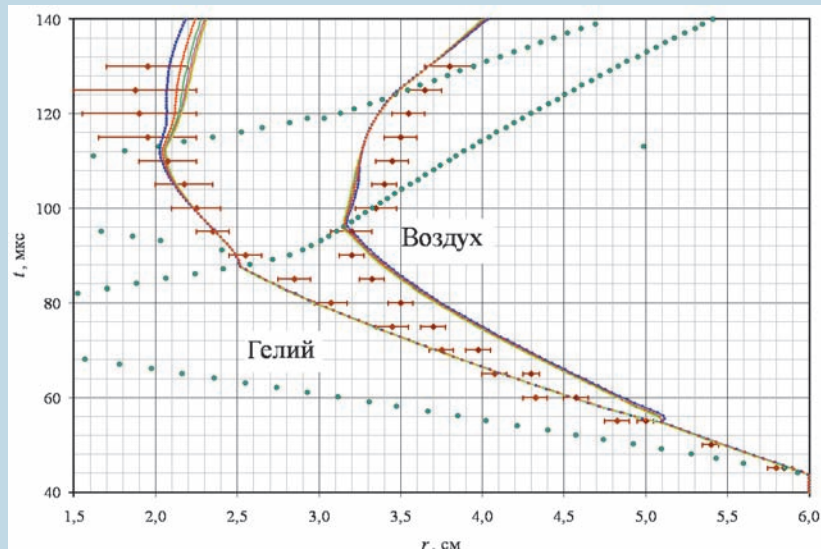
трехмерных уравнений Навье — Стокса требуются чрезвычайно большие объемы памяти и быстродействие ЭВМ. По этой причине для ее описания используются полуэмпирические





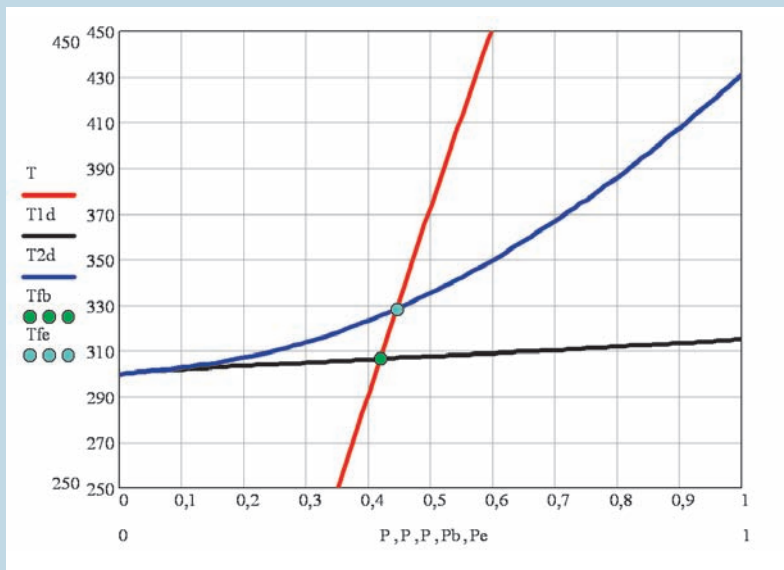
Изменение среднего квадрата продольных пульсаций скорости при взаимодействии изотропной турбулентности и стационарной ударной волны; расчеты на сходимость по модифицированному варианту модели Никифорова: \blacklozenge — Барр и др. 1996 г. Расчеты по программе ВИХРЬ: \blacksquare — сетка 200; \blacklozenge — сетка 400; \blacktriangle — сетка 800; \blacklozenge — сетка 1600; \blacktriangle — сетка 3200

модели. Во ВНИИЭФ широкое признание получила одномерная модель В. В. Никифорова. В настоящее время разработана модификация модели, в которой физически адекватно описывается взаимодействие ударной волны и турбулентности без явного выделения фронта ударной волны. Для инициализации счета модельных уравнений предложен алгоритм, основанный на анализе поведения малых возмущений контактных границ и позволяющий полностью автоматизировать процесс расчета турбулентных течений. Эффективность модификации иллюстрируют результаты моделирования опыта, в котором исследовалось взаимодействие изотропной турбулентности и стационарной ударной волны интенсивностью $M = 2,8$ с измерением мгновенных значений скорости течения, и опыта, в котором исследовалось развитие зоны перемешивания на цилиндрической границе гелий-воздух, ускоряемой сходящейся цилиндрической ударной волной. В расчетах получены сходимость



Развитие зоны турбулентного перемешивания на цилиндрической границе разноплотных газов, ускоряемой сходящейся ударной волной; расчеты на сходимость по модифицированному варианту модели Никифорова (параметры начального возмущения: $a_0 = 75$ мкм и $k = 34$ см $^{-1}$):

- \blacklozenge — Андронов, Мешков и др., 1982 г. Расчеты по программе ВИХРЬ:
- \bullet — ударная волна,
- \blacksquare — сетка 126+148+64;
- \blacklozenge — сетка 252+296+128;
- \blacktriangle — сетка 504+592+256;
- \blacklozenge — сетка 1008+1184+512;
- \blacktriangle — сетка 2016+2368+1024;
- \blacklozenge — сетка 4032+4736+2048



Кривая фазового равновесия $T(P)$, зависимости температуры от давления на ударных адиабатах ПММА для первого T1d и второго T2d фазовых состояний. Нижняя точка — точка начала фазового превращения, верхняя точка — конечная точка фазового превращения. $[T] = K$, $[P] = ГПа$, $q_0 = -0,2$ кДж/г

разностного решения и вполне удовлетворительное согласие с экспериментом с точностью в пределах погрешности измерений. Ведется работа над реализацией двумерной версии модели Никифорова.

При применении уравнений состояния в форме Ми — Грюнайна построена линия равновесия для двух фазовых состояний ПММА. Вычислена удельная теплота $q(P)$ и полная теплота $Q(\alpha)$ фазового превращения.

Трактовка фазового превращения как процесса вязкого трения и введение эффективной второй вязкости, моделирующей фазовое превращение, позволили обосновать возможность снижения плотности в области фазового превращения на фронте ударной волны без нарушения требований со стороны законов сохранения потоков массы и импульса.

За последнее десятилетие в России и в мире наблюдается значительный интерес к получению материалов с помощью различных методов интенсивной пластической деформации

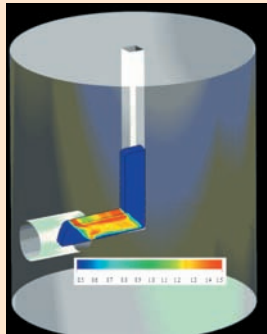
(ИПД), когда интенсивность деформации достигается с помощью высокого всестороннего давления. Посредством таких методов можно значительно изменить микроструктуру металлов и сплавов до наноразмеров, когда средний размер зерна будет измеряться десятками нанометров. Объемные наноструктурированные материалы,

полученные методами ИПД, характеризуются уникальным комплексом физико-механических свойств:

- высокой прочностью при сохранении достаточной пластичности;
- высокоскоростной и низкотемпературной сверхпластичностью;
- измененными модулем упругости, температурой Дебая и Кюри;
- аномальной диффузионной активностью;
- рекордными магнитными свойствами.

Интерес к подобным материалам от чисто научного уже перешел в область практического применения. В медицине наноструктурированный чистый титан получил широкое применение для изготовления различных имплантатов. Наряду с оптимальным соотношением прочностных характеристик, он имеет и максимальную биологическую совместимость. Сейчас наноструктурированные материалы находят применение в машиностроении, авиастроении и т. д.

Совместными усилиями специалистов РФЯЦ-ВНИИЭФ, других российских центров и американских (Лос-Аламос) ученых созданы эксперименталь-



Устройство для создания интенсивной пластической деформации

ные установки для получения материалов с уникальными характеристиками, и разработаны методики, позволяющие моделировать процесс ИПД.

Во ВНИИЭФ разработан метод определения реакции ВВ на аварийные тепловые воздействия с помощью численного моделирования, основанный на последовательном анализе двух стадий: 1) от начала нагрева до воспламенения; 2) развитие горения и переход во взрыв.

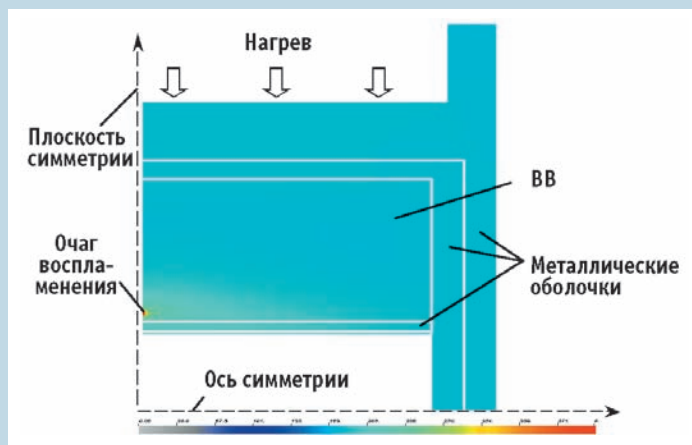
Для анализа первой стадии используются разработанные во ВНИИЭФ компьютерные программы, позволяющие проводить сквозные расчеты нагрева и воспламенения ВВ в составе сложной конструкции в двумерной и трехмерной геометрии с учетом следующих физических процессов:

- теплопроводности в материалах конструкции;
- лучистой и конвективной теплопередачи в полостях конструкции;
- химической кинетики в областях с ВВ (одностадийной и многостадийной).
- фазовых переходов (плавление) элементов конструкции;
- «вспучивания» теплозащитных покрытий.

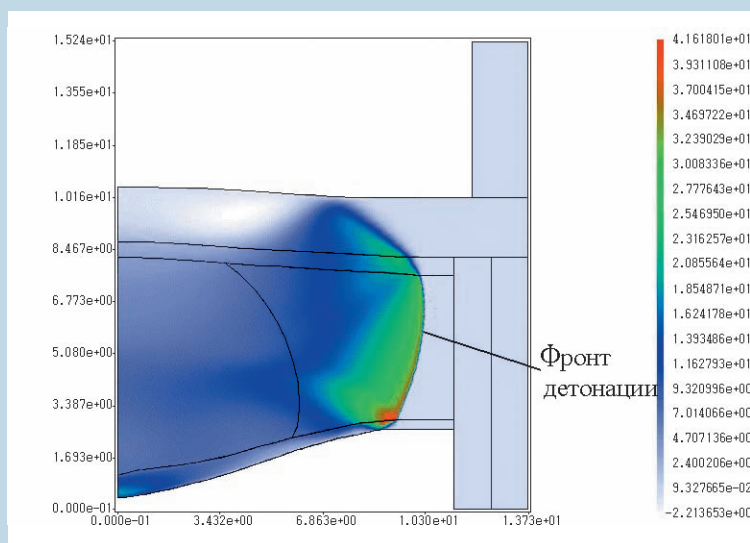
На этой стадии определяются время задержки воспламенения, расположение очага, а также поля температуры и концентрации ВВ на момент воспламенения.

В случае, если ВВ воспламеняется, исследуется вторая стадия. При этом результаты расчета первой стадии используются как исходные данные. Анализ второй стадии проводится с помощью разработанной во ВНИИЭФ двумерной газодинамической компьютерной программы, в которую встроена модель перехода горения в детонацию (ПГД).

Рассчитана задача о тепловом инициировании ВВ LX-10 массой ~ 7 кг в сборке в форме полого цилиндра, нагреваемой с наружной боковой поверхности, применительно к описанию экс-



Расчетное распределение температуры (°C)
на момент воспламенения $t_g = 753$ мин



Расчетное распределение давления (ГПа)
на момент $t = 80$ мкс после воспламенения

периментов с тепловым взрывом (см. рисунок).

В отличие от большинства подходов заложенная в данный метод идея рассмотрения цепочки связанных физических процессов позволяет прогнозировать максимально возможный спектр откликов ВВ на второй стадии: от детонации до спокойного сгорания без взрыва.

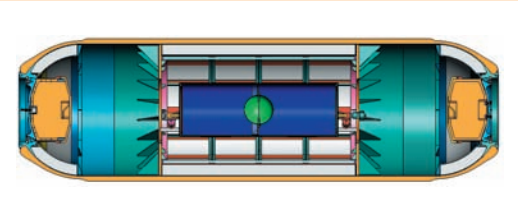
Для решения задач по определению напряженно-деформированного состояния элементов сложных пространственных конструкций с учетом нелинейного поведения материала и контактного взаимодействия при интенсивных механических и

тепловых нагрузениях в двух- и трехмерной постановках создан программный комплекс ДРАКОН.

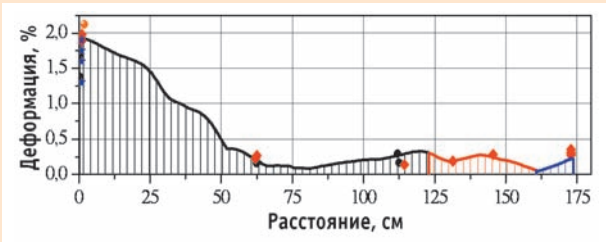
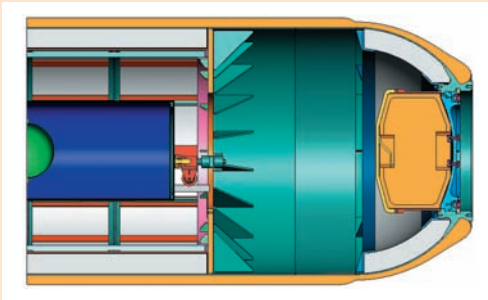
С использованием комплекса, решены практические задачи — расчета реакции взрывостойкого металлокомпозитного контейнера АТ595;

— моделирования пробития составной преграды высокоскоростным ударником;

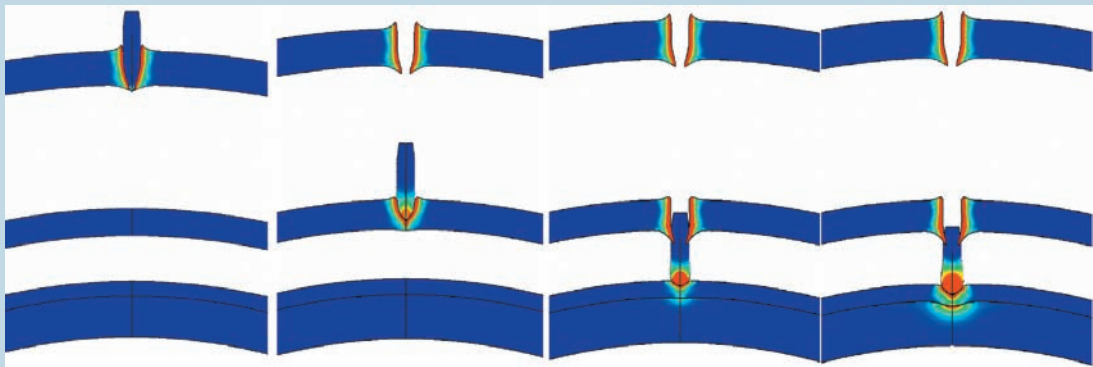
— моделирования разрушения цилиндрической трубы при взрывном нагружении.



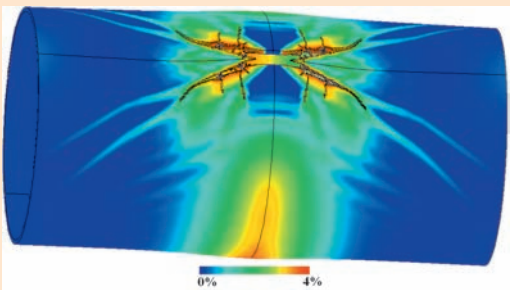
Конструкция контейнера AT595



Расчетные и экспериментальные данные по деформации на наружной поверхности корпуса контейнера при взрыве заряда ВВ 8 кг ТНТ в инертной упаковке массой 36 кг



Положение составной преграды и ударника на различные моменты времени



Конечное состояние цилиндрической трубы в эксперименте и расчете