На правах рукописи

Алексеев Михаил Владиславович

Математическое моделирование термомеханических процессов в многофазных средах

Специальность 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

Научный руководитель: **Савенков Евгений Борисович**,
доктор физико-математических наук, в.н.с.
ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

Официальные оппоненты: **Колдоба Александр Васильевич**,
доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой моделирования
и технологий разработки нефтяных месторождений,
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»

Серёжкин Алексей Александрович,
кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник,
Федеральное государственное унитарное предприятие
«Всероссийский научно-исследовательский институт
автоматики им. Н. Л. Духова»

Ведущая организация: Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки
Институт проблем механики
им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук

Защита состоится 16 ноября 2023 года в 14:00 на заседании диссертационного совета 24.1.237.01 при ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по адресу 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке
ИПМ им. М. В. Келдыша РАН.

Автореферат разослан «___» __________ 2023 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.237.01,
кандидат физ.-мат. наук М.А. Корнилина

1 Общая характеристика работы

Актуальность работы и современное состояние работ по тематике исследования

Математическое моделирование поведения многофазных конденсированных сред с прямым разрешением динамики границ раздела фаз с применением эйлерового описания среды в настоящее время становится все более актуальным. С одной стороны, это связано с обилием практических приложений (к которым относятся, в частности, задачи физики взрыва и удара), с другой — с увеличением сложности решаемых задач. Эйлеровы подходы обладают рядом преимуществ по сравнению с традиционными лагранжевыми и смешанными эйлерово-лагранжевыми. В частности, они позволяют учитывать такие процессы, как фрагментация среды, термодинамически согласованный учет поверхностных сил, контактных разрывов, фазовых переходов — без явного выделения и аппроксимации расчетной сеткой соответствующих внутренних границ. Помимо этого, в соответствии с современными представлениями, эйлеровы подходы считаются перспективными для решения задач со «сверхбольшими» деформациями.

В настоящее время известно множество математических моделей, обладающих указанными свойствами. По способу разрешения границ их можно условно разделить на два класса. Первый включает в себя модели с «четкой» границей. В этом случае поверхности раздела фаз представляют собой достаточно гладкие многообразия коразмерности один во вмещающем среду пространстве. В каждой из подобластей однородности (фазе) поведение системы описывается в рамках выбранной модели, при этом ее параметры и решения могут терпеть разрыв на межфазной границе. Для моделей данного класса необходимо явно формулировать условия согласования на межфазных границах. Второй класс моделей состоит из моделей с «диффузной» границей, где предполагается, что зоны однородности отделены друг от друга узким слоем конечной толщины, в пределах которого значения физических полей меняются непрерывно, но быстро. В этом случае условия согласования обычно не формулируются явно в виде независимых соотношений, а входят в правые части уравнений, описывающих динамику среды. В настоящее время к задачам такого типа проявляется большой интерес. Разработки ведутся как в направлении создания эффективных вычислительных алгоритмов, так и построения математических моделей.

В общем случае, в рамках моделей динамики многофазных сред, каждая фаза имеет свою собственную скорость и свой набор термодинамических параметров (таких как плотность, температура, давление, энергия). Наиболее общей моделью рассматриваемого класса является полностью неравновесная модель Баера-Нунциато, состоящая из 7 уравнений [1]. При наличии релаксационных слагаемых могут быть построены «более равновесные» модели, которые получаются при асимптотическом стремлении к нулю времени релаксации всех или части переменных. Так, например, равновесная по скорости модель включает в себя 6 уравнений [2]. Далее она может быть упрощена до равновесной по скорости и давлению модели[3]. Наконец, равновесная по скорости, давлению и температуре модель представляет собой систему уравнений Эйлера с реактивными слагаемыми для одной фазы. Модель, равновесная по скорости, давлению, температуре и химическому потенциалу, представляет собой классическую систему уравнений Эйлера газовой динамики. Известен целый ряд формулировок модели Баера-Нунциато, которые отличаются способом замыкания соответствующей системы уравнений, гарантирующим гиперболичность моделей указанного типа[4].

В указанных выше моделях предполагается, что поведение фаз описывается только шаровой частью тензора напряжений фазы. В более общем случае необходимо учитывать сдвиговые напряжения, в частности, в рамках гиперупругих моделей.

Одним из примеров однофазных моделей такого типа является модель Годунова-Роменского[5]. В настоящее время известно крайне ограниченное число работ, касающихся разработки и обоснования многоскоростных и многофазных гиперболических математических моделей, описывающих динамику среды с гиперупругим поведением.

Типичной особенностью данных постановок является наличие в системе уравнений математической модели неконсервативных слагаемых. Это не позволяет традиционным образом определить обобщенное решение задачи. По этой причине для корректного учета неконсервативных слагаемых исполь-

[1] Baer M. R., Nunziato J. W. Theory for deflagration-to-detonation transition (DDT) in granular explosives. – Sandia National Labs., Albuquerque, NM (USA), 1983. – № SAND-82-0293.

[2] Kapila A., Menikoff R., Bdzil J., Son S., Stewart D. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations // Physics of Fluids. 2001. vol. 13. № 10. pp. 3002–3024.

[3] Kapila A., Son S., Bdzil J., Menikoff R., Stewart D. Two-phase modeling of DDT: Structure of the velocity-relaxation zone // Physics of Fluids. 1997. vol. 9. № 12. pp. 3885–3897.

[4] Gallouët T., Hérard J., Seguin N. Numerical modeling of two-phase flows using the two-fluid two-pressure approach // Mathematical Models and Methods in Applied Sciences. 2004. vol. 14. № 05. pp. 663–700.

[5] Годунов С., Роменский Е. Нестационарные уравнения нелинейной теории упругости в эйлеровых координатах // ПМТФ, № 6, Т. 13, 1972. С. 124-144.

зуется один из трех основных подходов: 1) теория Dal Maso, Lefloch, Murat (DLM)[6], основанная на определении так называемых «неконсервативных произведений» как борелевских мер, определяемых через гладкую аппроксимацию скачков с помощью пути — гладкого отображения, интерполирующего решение между значениями на разрыве; 2) определение обобщенного произведения, основанного на теории обобщенных функций Colombeau[7]; 3) рассмотрение кривых Alouges-Merlet[8], которые представляют собой специальные аппроксимации ударных кривых.

При решении задач рассматриваемого класса могут быть использованы различные вычислительные алгоритмы. Основной проблемой, возникающей при их построении, является следующая. Как известно, численное решение задачи сходится к решению, которое определяется диссипативными слагаемыми, входящими в первое дифференциальное приближение схемы. Для неконсервативных гиперболических систем уравнений вид обобщенного (разрывного) решения зависит от вида указанных вязких членов. Таким образом, численные решения, полученные с помощью различных разностных схем, сходятся к различным обобщенным решениям задачи — если только первое дифференциальное приближение не совпадает с уравнением, с помощью которого определен класс обобщенных решений в дифференциальной постановке задачи. Отметим, что для консервативных гиперболических систем вид обобщенного решения не зависит от вида диссипативных слагаемых и, таким образом, вид первого дифференциального приближения до известной степени не важен. Задача построения разностных схем, которые обеспечивают сходимость численных решений к априорно заданному классу обобщенных в настоящее время является не до конца решенной, — и одной из центральных проблем построения разностных схем для неконсервативных гиперболических систем уравнений. Помимо этого, численная схема должна правильным образом учитывать обобщенные соотношения на разрывах. Вычислительные алгоритмы также должны включать в себя возможность учета процессов жесткой релаксации и использовать наиболее экономичные по вычислительным затратам методы введения искусственной диссипации для монотонизации решения.

Таким образом, разработка, обоснование и применение чисто эйлеровых математических моделей для описания динамики многофазных сред с пря-

[6]Dal Maso G., Lefloch P., Murat F. Definition and weak stability of nonconservative products // Journal de mathématiques pures et appliquées. 1995. vol. 74. № 6. pp. 483–548.

[7]Colombeau J.-F. Multiplication of distributions // Bulletin of the american mathematical society. 1990. vol. 23. № 2. pp. 251–268.

[8]Alouges F., Merlet B. Approximate shock curves for non-conservative hyperbolic systems in one space dimension // Journal of Hyperbolic Differential Equations. 2004. vol. 1. № 4. pp. 769–788.

мым разрешением динамики межфазных границ, гиперупругим (и более сложным) поведением фаз и имеющих вид гиперболических систем уравнений первого порядка, равно как и эффективных и корректных вычислительных алгоритмов для решения этого класса задач является актуальной и не до конца решенной проблемой на стыке современной механики сплошной среды, вычислительной математики и суперкомпьютерного математического моделирования. Решению ряда конкретных задач в рамках указанного направления посвящена настоящая работа.

Научной проблемой, на решение которой направлена работа, является создание новых средств математического моделирования (как самих математических моделей, так и вычислительных алгоритмов и программных комплексов) динамики многофазных сред с прямым разрешением межфазных границ. При этом математические модели должны быть чисто эйлеровыми, представлять собой гиперболические системы первого порядка, допускать обобщение на случай гиперупругого поведения сред. Соответствующие вычислительные алгоритмы должны обеспечивать возможность решения задачи с необходимой точностью, являться устойчивыми и применимыми к широкому классу постановок задач. Программная реализация должна учитывать возможность решения задач на вычислительных сетках актуальных размерностей. Настоящая работа посвящена решению, по крайней мере частичному, этих проблем.

Цели и задачи исследования. Целью работы является создание комплекса средств математического моделирования для анализа динамики многофазных сред в рамках эйлерового подхода. Основными направлениями исследований является решение задач с прямым разрешением границ раздела фаз и с существенно различными свойствами фаз (материалов). Для достижения поставленной цели решены следующие задачи:

1. Выполнен анализ современных методов моделирования многофазных гидродинамических течений с прямым разрешением динамики границ раздела фаз
2. Разработаны математические модели для описания многофазных гидродинамических течений с прямым разрешением динамики границ раздела фаз, в том числе с фазами, имеющими гиперупругое поведение.
3. Разработаны вычислительные алгоритмы для решения задач многофазной гидродинамики в рассматриваемом классе постановок.
4. Разработанные модели и алгоритмы реализованы в виде параллельного программного комплекса, пригодного для моделирования задач в реали-

стичных постановках.

5. Выполнены валидация и верификация разработанных математических моделей, алгоритмов и их программной реализации.

Научная новизна исследования состоит в:

1. Новой полностью неравновесной чисто эйлеровой математической модели типа Баера-Нунциато для описания динамики многофазной среды с гиперупругим поведением фаз. Модель характеризуется набором из двух «интерфейсных» скоростей, ее частными случаями являются большинство представленных в литературе сред с шаровым тензором напряжений. Модель является термодинамически согласованной, ее вывод выполнен в рамках методов рациональной термомеханики сплошных сред.
2. Новых вычислительных алгоритмах решения уравнений модели типа Баера-Нунциато и модели типа Годунова-Роменского для описания динамики многофазных сред на основе разрывного метода Галеркина с использованием новой многосоставной схемы лимитирования консервативных и простых переменных.
3. Параллельной программной реализации разработанных моделей и алгоритмов, пригодной для моделирования многофазных гидродинамических течений и динамики неоднородных сред с гиперупругим поведением фаз в дискретных постановках актуальных сеточных размерностей.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в разработанных математических моделях, соответствующих вариантах алгоритмов разрывного метода Галеркина и параллельной программной реализации, пригодной для анализа задач в реалистичных постановках.

Методология и методы исследования. Для решения поставленных в диссертационной работе задач использованы методы механики сплошной среды, теория численных методов, теория неконсервативных гиперболических систем уравнений.

Достоверность результатов исследования обеспечена использованием в работе современных представлений механики, самосогласованных и непротиворечиво связанных математических моделей, построенных на основе фундаментальных законов механики с использованием методов рациональной термодинамики; использованием методов вычислительной математики и математического моделирования; валидацией и верификацией разработанных математических моделей, вычислительных алгоритмов и их программной реализации.

Положения, выносимые на защиту.

1. Разработаны математические модели, пригодные для описания динамики многофазных сред с прямым разрешением динамики раздела фаз, в том числе для сред с гиперупругим поведением. Вывод моделей выполнен термодинамически обоснованным способом, известные модели типа Баера-Нунциато с шаровым тензором напряжений являются частными случаями предложенной в работе модели.
2. Разработан комплекс вычислительных алгоритмов на основе разрывного метода Галеркина для моделирования динамики многофазных сред.
3. Выполнена параллельная программная реализация разработанных алгоритмов.
4. Представлены результаты численного решения задач в тестовых и содержательных постановках, подтверждающие корректность реализованных моделей и алгоритмов для целевого класса задач.

Соответствие работы паспорту специальности. Целью диссертационной работы является разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и их программная реализация, что вносит вклад в следующие области исследований, перечисленные в паспорте специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»:

- разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений;
- разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий;
- реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на следующих конференциях и семинарах:

1. Международная конференция «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций», г. Томск, 1-5 октября 2019 г.
2. Международная конференция «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций», г. Томск, 1-5 октября 2018 г.
3. International Conference on Mathematical Modelling in Physical Sciences, г. Москва, 27–31 октября 2018 г.

4. 4-ая Международная научная школа молодых ученых «Физическое и математическое моделирование процессов в геосредах», г. Москва, 24-26 октября 2018 г.
5. Международная конференция «Современные проблемы механики сплошной среды», посвященная памяти академика Леонида Ивановича Седова в связи со стодесятилетием со дня его рождения, г. Москва, 15 ноября 2017 г.
6. Семинар «Математическое моделирование» под руководством В. Ф. Тишкина и А. А. Кулешова, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, г. Москва, 17 января 2023 г.
7. Семинар «Вычислительные методы и математическое моделирование» им. Ю.П. Попова под руководством проф. М. П. Галанина и проф. В. М. Чечёткина в ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, г. Москва (№ 280, 26 декабря 2022 г.; № 259, 27 декабря 2021 г.; № 211, 19 ноября 2018 г.)

Личный вклад соискателя. Все представленные в работе и выносимые на защиту результаты получены лично автором или при его непосредственном участии. Общая концепция работы, ее структура, уровень понимания рассматриваемых в ней проблем, основные результаты и выводы работы, положения, выносимые на защиту, отражают творческий вклад автора. В совместных публикациях по теме диссертации вклад автора состоит в постановке и решении конкретных задач, включая построение математических моделей и разработку вычислительных алгоритмов, программную реализацию, постановку и определение целей вычислительных экспериментов, проведение расчетов и анализ результатов.

Личный вклад соискателя в публикациях по теме диссертации:

- в работах [2, 4–6] — постановка ряда тестовых задач, разработка вычислительных алгоритмов, разработка части программного комплекса, проведение ряда вычислительных экспериментов;
- в работах [7–10] — разработка математической модели и программного комплекса;
- в работе [3] — разработка математической модели, исследование ее частных случаев.

Публикации. По теме работы опубликовано 11 печатных работ [1–11]. Из них 11 публикаций — в изданиях, включенных в перечень ВАК; 9 — в изданиях, индексируемых в РИНЦ; 5 — в изданиях, индексируемых в Scopus; 1 — в изданиях, индексируемых в Web of Science, 1 в сборниках трудов конференций.

2 Содержание работы

Работа состоит из введения, 6 глав, заключения и списка литературы. Объем работы составляет 128 страниц и содержит 21 рисунок и 7 таблиц.

Во **введении** сформулированы цели и задачи исследования, обоснованы актуальность и научная значимость работы, указаны сведения об апробации работы и публикациях результатов исследований.

В **первой главе** проанализированы существующие подходы к моделированию многофазных сред. Представлено несколько видов классификации существующих на данный момент семейств физико-математических моделей поведения многофазных и многоматериальных сред. Также в главе представлен анализ методов построения термодинамически согласованных моделей поведения многофазных и многоматериальных сред.

В настоящее время для решения задач с «экстремальными» деформациями все большее значение приобретают методы, основанные на эйлеровом описании поведения среды. Помимо этого, дополнительные достоинства эйлеровых подходов проявляются при использовании реалистичных воксельных геометрических моделей среды.

Выполнена классификация моделей по характеру деформаций среды. Первый тип моделей в таком случае можно назвать «гидродинамическим». В этом случае уравнения модели в явном виде включают в себя уравнения закона сохранения массы фаз и не включают уравнения относительно тензора дисторсии или иных тензорных мер деформации.

Второй тип моделей — «упругие» и «смешанные» многоматериальные модели. Под такими моделями понимаются модели, в которых по крайней мере одна фаза является деформируемым твердым телом. В этом случае уравнения модели в явном виде включают в себя выражения относительно тензора дисторсии или иных тензорных мер деформации. Частным случаем является ситуация, когда все фазы деформируются как твердые тела, например, все фазы являются гиперупругими. Методы построения термодинамически согласованных моделей можно условно разделить на два основных подхода: 1) методы, основанные на усреднении мезоскопических моделей поведения среды; 2) методы феноменологической рациональной механики сплошных сред.

Во **второй главе** представлен систематический вывод гиперупругого обобщения модели Баера-Нунциато в рамках методов рациональной термомеханики сплошной среды. Отправной точкой вывода является выбор: а) конкретного набора первичных термодинамических переменных модели; б) общей формы основных законов сохранения без уточнения вида обменных слагаемых и в) энтропийного неравенства в подходящем виде. Полный набор определяющих соотношений модели, включая вид обменных слагаемых, устанавливается в ходе вывода. Особенностью настоящей модели, отличающей ее от других, является наличие полного, не шарового, тензора термодинамических напряжений. Построенная в настоящей работе модель является чисто эйлеровой и полностью неравновесной.

При построении модели использованы «аксиомы Труселлла»[9] для указания структуры многофазной модели с учетом того, как устроены более простые однофазные модели. В качестве однофазного «предельного» случая многофазной гиперупругой модели выступает гиперупругая модель Годунова-Роменского. При выводе модели динамики многофазных сред использованы два предположения: 1) поведение каждой фазы при отсутствии межфазного взаимодействия совпадает с поведением однофазной среды; 2) законы сохранения для смеси должны иметь такой же вид, как и для однофазной среды, и следовать из законов сохранения для каждой из фаз.

В соответствии со сформулированными выше принципами многофазная модель строится из основополагающих законов сохранения для каждой из фаз $p = 1, 2$ с учетом обменных слагаемых и определяющих соотношений для истинных тензоров дисторсии фаз. Законы сохранения должны быть дополнены энтропийным неравенством в нужной форме. Для вывода замкнутой формулировки модели обменные слагаемые в законах сохранения выбираются таким образом, чтобы удовлетворялось энтропийное неравенство. Наиболее общая форма разработанной модели имеет вид:

$$\partial_t \alpha^p + \mathbf{u}^{\mathrm{I}} \cdot \nabla \alpha^p = -\frac{1}{3}\xi \left(\mathcal{K}^p - \mathcal{K}^{\bar{p}}\right) : \mathbf{I}, \tag{1a}$$

$$\partial_t \rho^p + \nabla \cdot \left(\rho^p \mathbf{u}^p\right) = 0, \tag{1b}$$

$$\partial_t \left(\rho^p \mathbf{u}^p\right) + \nabla \cdot \left(\rho^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p\right) = -\mathbf{T}^{\mathrm{I}} \cdot \nabla \alpha^p + \chi \left(\mathbf{u}_k^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p\right), \tag{1c}$$

$$\begin{aligned}\partial_t \left(\rho^p E^p\right) + \nabla \cdot \left(\rho^p E^p \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p \cdot \mathbf{u}\right) = -\mathbf{T}^{\mathrm{I}} : \left(\mathbf{u}^{\mathrm{I}} \otimes \nabla \alpha^p\right) + \\ + \chi \mathbf{w}^{\mathrm{I}} \cdot \left(\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p\right) + \frac{1}{3}\xi \pi^{\mathrm{I}} \left(\mathcal{K}^p - \mathcal{K}^{\bar{p}}\right) : \mathbf{I} + \phi \left(\theta^{\bar{p}} - \theta^p\right),\end{aligned} \tag{1d}$$

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{A}}^p = -\left(\nabla \otimes \mathbf{u}^p\right) \cdot \mathbf{A}^p - \\ - \omega \frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p - \bar{\omega} \frac{1}{\alpha^p} \left[\frac{1}{3}\mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + \left(\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^{\mathrm{I}}\right) \otimes \nabla \alpha^p\right] \cdot \mathbf{A}^p,\end{aligned} \tag{1e}$$

[9] Truesdell C. Rational Thermodynamics. Springer New York, 2012-12-06.

где α^p — объемная доля, ρ^p — плотность, $\mathbf{u}^p$ — скорость, E^p — энергия, $\mathbf{A}^p$ — тензор дисторсии, $\mathbf{T}^p$ — тензор напряжений фазы p; $\mathbf{u}^{\mathrm{I}}$ — первая интерфейсная скорость, $\mathbf{w}^{\mathrm{I}}$ — вторая интерфейсная скорость, $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$ — интерфейсное напряжение, π^{I} — второе интерфейсное давление. Определяющие соотношения имеют вид:

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{T}^{\mathrm{I}} = \frac{\mathcal{K}^{(1)}\kappa^{(2)}\theta^{(2)} + \mathcal{K}^{(2)}\kappa^{(1)}\theta^{(1)}}{\kappa^{(1)}\theta^{(1)} + \kappa^{(2)}\theta^{(2)}},\\
&\mathcal{K}^p = \frac{1}{\alpha^p}\left(\omega\frac{\mathbf{T}^p{:}\mathbf{I}}{3}\mathbf{I} + (1-\omega)\,\mathbf{T}^p\right) + \beta^p\mathbf{I}, \quad \omega \in [0,1]\,,\\
&\mathbf{u}^{\mathrm{I}} = \kappa^{(1)}\mathbf{u}^{(1)} + \kappa^{(2)}\mathbf{u}^{(2)}, \quad \kappa^p + \kappa^{\bar{p}} = 1,\\
&\mathbf{w}^{\mathrm{I}} = \nu^p\mathbf{u}^p + \nu^{\bar{p}}\mathbf{u}^{\bar{p}}, \quad \nu^p + \nu^{\bar{p}} = 1,\\
&\pi^I = -\frac{1}{3}\left(\mu^p\mathcal{K}^p + \mu^{\bar{p}}\mathcal{K}^{\bar{p}}\right){:}\mathbf{I}, \quad \mu^p + \mu^{\bar{p}} = 1,\\
&\mathbf{T}^p = -2\rho^p\mathbf{G}^p\cdot\frac{\partial\psi^p}{\partial\mathbf{G}^p},\ \eta^p = -\frac{\partial\psi^p}{\partial\theta^p},\ \beta^p = \rho^p\frac{\partial\psi^p}{\partial\alpha^p},
\end{aligned}
$$

Полученная модель удовлетворяет принципам материальной объективности. Отметим наличие в правых частях уравнений (1) релаксационных слагаемых, зависящих от разности параметров течения фаз. При малых значениях времен релаксации они обеспечивают выравнивание параметров фаз, обеспечивая механическое и термодинамическое равновесие между ними.

В **третьей главе** представлены известные частные случаи представленной выше модели в том виде, в котором они использованы в дальнейшем. Рассмотрена модель Годунова-Роменского для описания динамики упругого тела в эйлеровой постановке. В первом параграфе сформулирован общеизвестный однофазный вариант, содержащий только консервативные слагаемые и единственное уравнение состояния в расчетной области. Далее введена характеристическая функция, применяемая для «взвешивания» параметров уравнений состояния фаз в расчетной области. Приведена формулировка неоднородной гиперупругой модели типа Годунова-Роменского. Также представлена модель Баера-Нунциато для описания динамики многофазных сред, указан конкретный вид замыкающих соотношений и уравнения состояния.

В **четвертой главе** представлен вычислительный алгоритм для системы гиперболических уравнений на основе разрывного метода Галеркина с алгебраическим восполнением решения произвольного порядка на трехмерных декартовых ортогональных сетках: описана общая схема для случая системы гиперболических уравнений, содержащих неконсервативные слагаемые, и способ введения обобщенного решения. Для неконсервативных систем невозможно корректно поставить задачу Римана аналогичным консервативному случаю способом, и обобщенное решение не может быть определено так же, как в консервативном случае. Помимо этого, невозможно стандартным способом корректно определить условия Гюгонио на разрывах и скорость распространения ударных волн. Для решения этой проблемы в настоящей работе использован подход, основанный на теории Dal Maso-LeFloch-Murat[10].

Общая схема решения основана на применении метода расщепления по физическим процессам. Представлен алгоритм расщепления, а также процедура интегрирования по времени с помощью метода Рунге-Кутты. Далее представлен алгоритм расчета релаксационных слагаемых и описаны варианты ограничителей (лимитеров), применяемых в данной работе. Сформулирован общий алгоритм лимитирования численного решения в поставленных задачах. В качестве составных частей полного алгоритма лимитирования применены три вида лимитеров: 1) лимитер Криводоновой[11], 2) лимитер WENO-S[12], 3) лимитер, обеспечивающий положительность объемных долей (и плотностей). Для представленных выше математических моделей использовано несколько алгоритмов лимитирования решения в соответствии с конкретной постановкой. В многомерных задачах представленные одномерные лимитеры применены последовательно вдоль каждого из направлений. Одной из существенных особенностей предложенных подходов к монотонизации решения является стратегия лимитирования непосредственно консервативных переменных системы, что существенно уменьшает вычислительные затраты на монотонизацию решения. Одним из важнейших типов физических постановок в рамках модели Баера-Нунциато являются многоматериальные постановки, при которых объемные доли фаз близки к 0 и 1, что соответствует почти чистым фазам в отдельных областях. При решении таких задач возникают трудности, связанные с возникновением областей, где давление фазы, близкое к 0, становится отрицательным, что ведет к некорректному пересчету полей плотностей и объемных долей. Для решения этой проблемы в диссертации разработан многосоставной алгоритм лимитирования.

В **пятой главе** представлено описание программной реализации исследуемых математических моделей, а также соответствующих вычислительных

[10]Dal Maso G., Lefloch P., Murat F. Definition and weak stability of nonconservative products // Journal de mathématiques pures et appliquées. 1995. vol. 74. № 6. pp. 483–548.

[11]Krivodonova L. Limiters for high-order discontinuous Galerkin methods // Journal of Computational Physics. 2007. vol. 226. № 1. pp. 879–896.

[12]Zhong X., Shu C.-W. A simple weighted essentially nonoscillatory limiter for Runge–Kutta discontinuous Galerkin methods // Journal of Computational Physics. 2013. vol. 232. № 1. pp. 397–415.

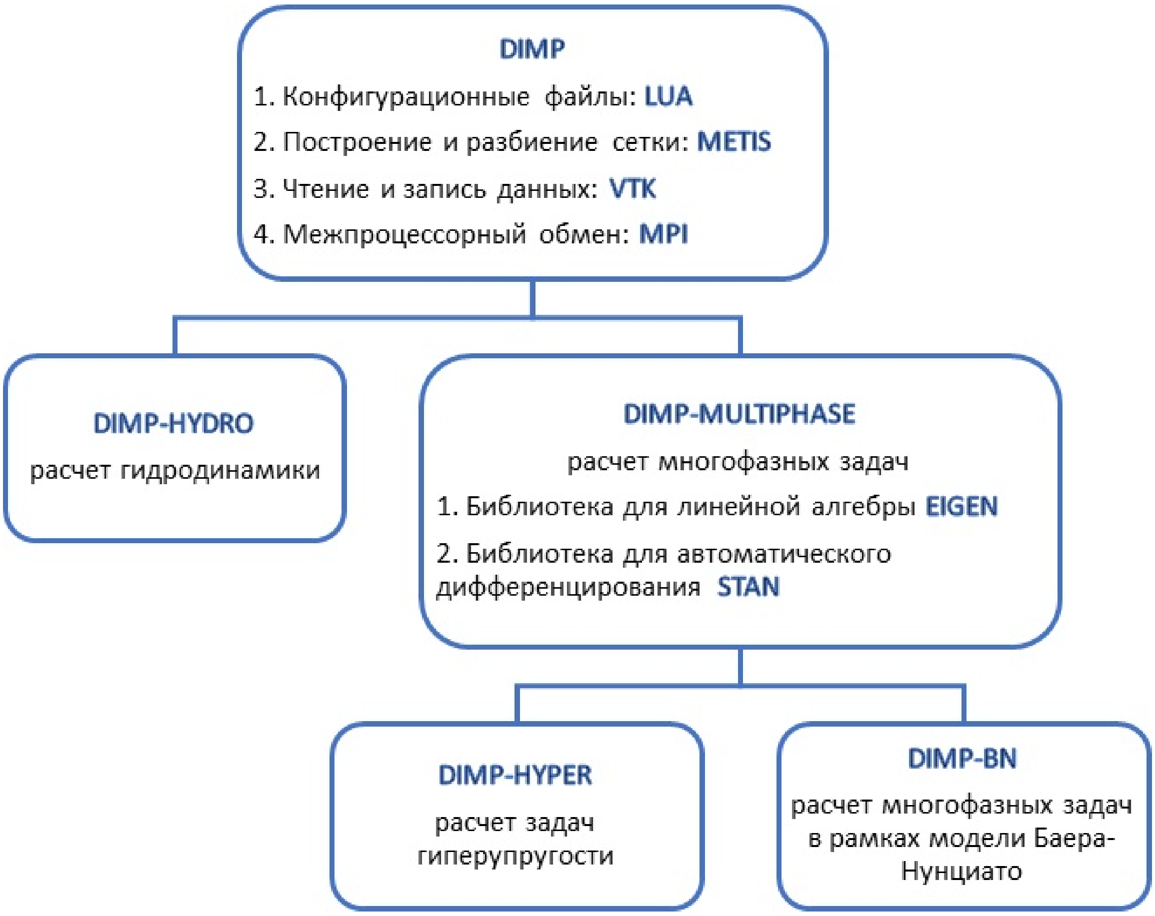


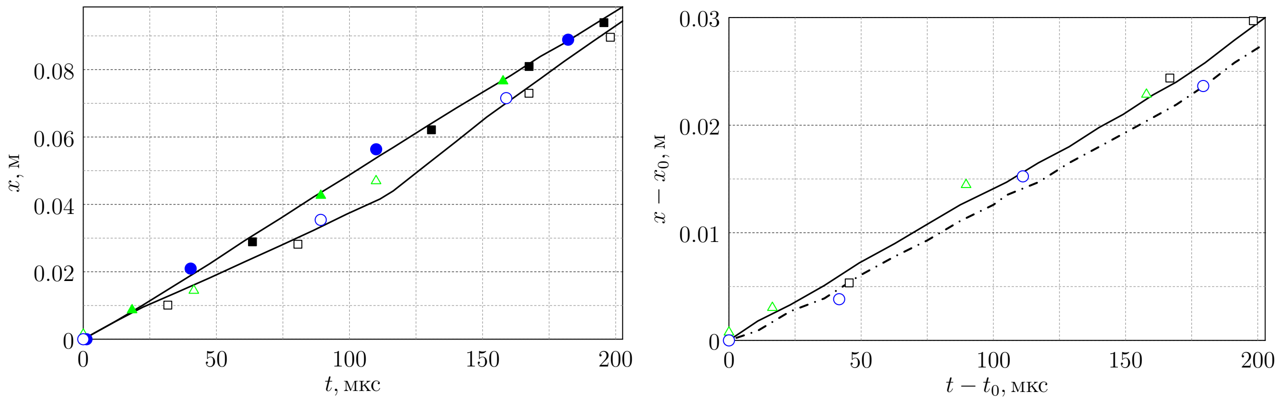
Рис. 1. Структура программного комплекса DIMP.

алгоритмов в виде программного комплекса DIMP-MULTIPHASE. Комплекс основан на программной платформе DIMP, которая предоставляет набор средств, обеспечивающих эффективную реализацию явных вычислительных алгоритмов для решения широкого класса задач с применением декартовых ортогональных сеток[13]. Структура комплекса изображена на рис. 1.

Языком реализации является C++ с использованием интерфейса параллельного программирования MPI. Разбиение расчетной сетки для межпроцессорного обмена осуществлено с помощью библиотеки Metis. Для написания конфигурационных файлов используется встраиваемый язык программирования Lua. Результаты расчетов могут быть сохранены в формате VTK.

Программный комплекс DIMP-Multiphase состоит из двух модулей: DIMP-Hyper для решения задач гиперупругости и DIMP-BN для решения

[13]Балашов В. А., Савенков Е. Б., Четверушкин Б. Н. Вычислительные технологии программного комплекса DiMP-Hydro для моделирования микротечений // Математическое моделирование. 2019. Т. 31. № 7. С. 21–44.



(a) X–t диаграммы для падающей и проходящей ударной волны

(b) X–t диаграммы для точки межфазной границы

Рис. 2. Результаты расчета для двумерной задачи прохождения ударной волны через среду, содержащую пузырек криптона (кривые — численный расчет, круги и треугольники — эксперимент)

задач многофазных течений. Общая база вычислительных алгоритмов реализована на уровне DIMP-Multiphase и предоставляет возможность проведения расчетов с использованием метода RK/DG с восполнением решения до произвольного порядка, а также интегрирование по времени методом Рунге-Кутты, задаваемом с помощью таблицы Бутчера.

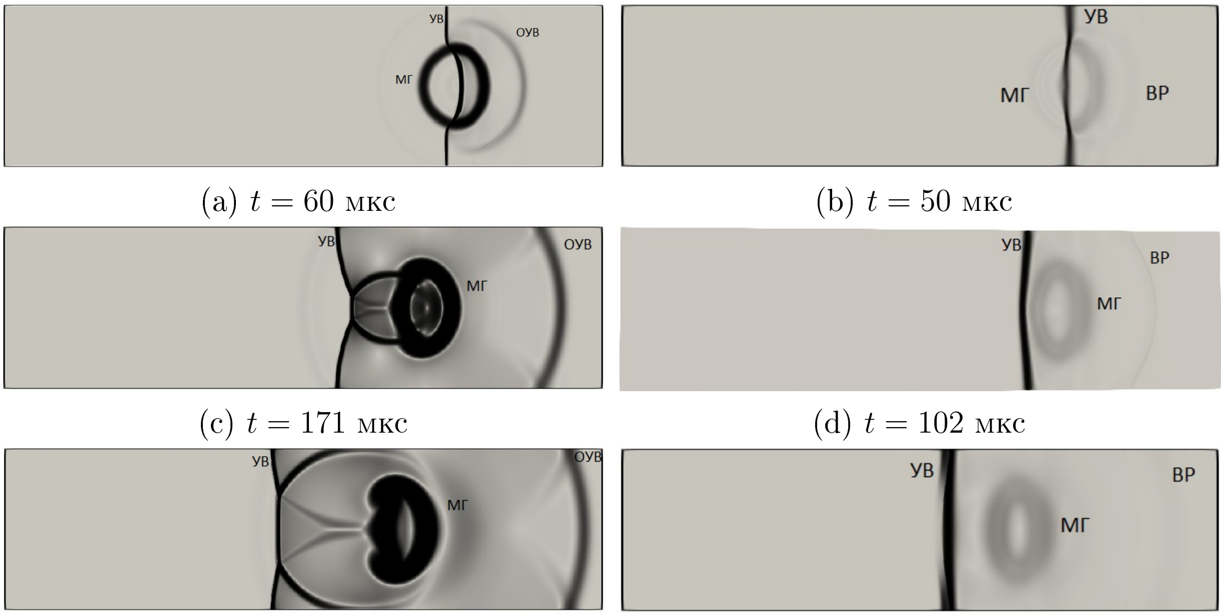
В **шестой главе** представлены результаты вычислительных экспериментов с использованием разрывного метода Галеркина и интегрирования по времени методом Рунге-Кутты третьего порядка (TVDRK3) для моделей Годунова-Роменского и Баера-Нунциато. Для модели Годунова-Роменского представлены результаты расчета однофазной однородной модели, приведены данные тестовых расчетов, а также приведены тесты для упругой задачи, содержащей неоднородности и различные параметры уравнения состояния для каждой из фаз. Продемонстрирована возможность применения разработанного программного комплекса к широкому классу задач в одномерной, двумерной и трехмерной геометрических постановках с использованием различных уравнений состояния.

Представлены результаты расчетов для тестов модели Баера-Нунциато без релаксации и с релаксацией. Рассмотрены постановки задач, в том числе соответствующие экспериментальным исследованиям — прохождение ударной волны через пузырьки с азотом, гелием и криптоном. Полученные результаты сравнены с результатами, опубликованными в литературе[14] и пред-

[14] Layes G., Le Métayer O. Quantitative numerical and experimental studies of the shock accelerated heterogeneous bubbles motion // Physics of Fluids. 2007. vol. 19. № 4. pp. 42105.; Nowakowski A., Ballil A., Nicolleau F. Passage of a shock wave through inhomogeneous media and its impact on gas-bubble deformation // Physical Review E. 2015. V. 92. № 2. p. 23028.

ставлены на рис. 2 (для криптона), см. также рис. 3.

Результаты трехмерного расчета моделирования прохождения ударной волны через пузырек гелия показаны на рис. 4. Качественное сравнение результатов расчета, полученных с помощью схем первого и второго порядков аппроксимации по пространству, представлено на рис. 5.



(a) $t = 60$ мкс (b) $t = 50$ мкс

(c) $t = 171$ мкс (d) $t = 102$ мкс

(e) $t = 240$ мкс (f) $t = 179$ мкс

Рис. 3. Шлирены для пузырька криптона (слева) и азота (справа) (УВ – ударная волна, МГ – межфазная граница, ОУВ – отраженная УВ, ВР – волна разрежения)

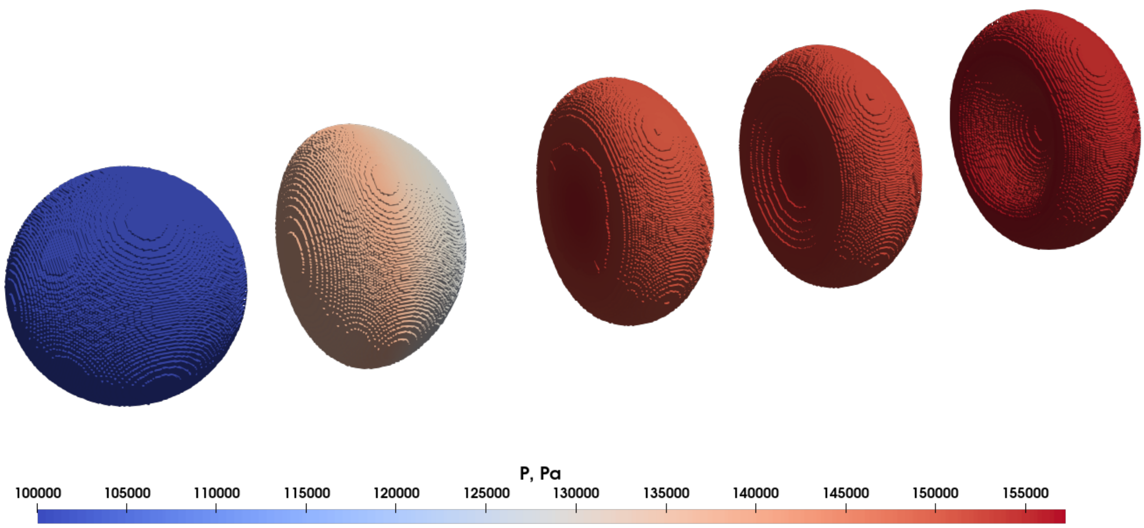


Рис. 4. Эволюция формы пузырька азота в ходе распространения ударной волны для трехмерного расчета

(a) 1ый порядок (b) 2ой порядок

Рис. 5. Результаты расчета для пузырька азота. Цветом показана объемная доля.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. Математические модели для описания динамики многофазных сред с прямым разрешением динамики раздела фаз, в том числе для сред с гиперупругим поведением фаз.
2. Комплекс вычислительных алгоритмов на основе разрывного метода Галеркина для моделирования динамики многофазных сред.
3. Параллельная программная реализация разработанных алгоритмов.
4. Результаты расчетов, подтверждающие корректность реализованных моделей и алгоритмов для целевого класса задач.

3 Публикации автора по теме диссертации

По теме работы опубликовано 11 печатных работ в изданиях, входящих в перечень ВАК. Среди них 8 работ в изданиях, индексируемых в международных базах цитирования, 1 — в сборниках трудов конференций и 2 — в иных изданиях:

[1] Алексеев М.В. Численное моделирование двухфазных течений в рамках релаксационной модели Баера-Нунциато // Вычислительные методы и программирование. – 2023. – Т. 24. С. 182-194.

[2] Полехина Р., Алексеев М., Савенков Е. Валидация вычислительного алгоритма на основе разрывного метода Галеркина для релаксационной модели Баера-Нунциато //Дифференциальные уравнения – 2022. – Т. 58. – № 7. – С. 977-994.

[3] Алексеев М.В., Савенков Е.Б. Математическая модель двухфазной гиперупругой среды. «Скалярный» случай // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 40. 63 с.

[4] Alekseev M., Savenkov E. Runge–Kutta discontinuous Galerkin method for Baer–Nunziato model with «simple WENO» limiting of conservative variables //Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2021. – Vol. 36. – № 2. – pp. 57-74.

[5] Тухватуллина Р. Р., Алексеев М. В., Савенков Е. Б. Численное решение уравнений релаксационной модели Баера-Нунциато с помощью разрывного метода Галеркина //Дифференциальные уравнения. – 2021. – Т. 57. – № 7. – С. 988-1002.

[6] Алексеев М.В., Савенков Е.Б., Воронин Ф.Н. Численное решение уравнений Баера-Нунциато разрывным методом Галеркина // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2020. – № 48. – 23 с.

[7] Alekseev M., Savenkov E. Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for hyperbolic hyperelasticity equations for inhomogeneous medium. // Mathematica Montisnigri. – 2020. – Vol. 47. – pp. 52–64.

[8] Алексеев М.В., Савенков Е.Б. Применение разрывного метода Галеркина для решения одномерных гиперболических задач гиперупругости в неоднородной среде // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2019. – № 88. – 20 с.

[9] Алексеев М. В., Савенков Е. Б. Решение нелинейной задачи гиперупругости с использованием разрывного метода Галеркина //Физическое и математическое моделирование процессов в геосредах. – 2018. – С. 21-22.

[10] Alekseev M., Savenkov E. Numerical Simulation of Heterogeneous Hyperelastic Model with RKDG // Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes (2018) Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes (2018). : Springer – 2019. – pp. 295–302.

[11] Alekseev M., Savenkov E., Voronin F. RKDG method solution for hyperbolic hyperelastic model // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – Vol. 1141. – p. 12044.