

Федеральное государственное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В.  
Келдыша Российской академии наук»

На правах рукописи  
УДК 519.6

Алексеев Михаил Владиславович

**Математическое моделирование термомеханических процессов в  
многофазных средах**

Специальность 1.2.2 —

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Савенков Е. Б.

Москва — 2023

# Оглавление

Введение . . . . .	4
<b>Глава 1. Методы моделирования многофазных сред с разрешением межфазных границ . . . . .</b>	<b>10</b>
§ 1.1. Классификация моделей по способу разрешения границ . . . . .	12
§ 1.2. Модели «четкой границы» . . . . .	14
1.2.1. Представления поверхности в рамках подхода Volume of Fluid . . . . .	15
1.2.2. Метод множеств уровня(level-set method) . . . . .	17
1.2.3. Другие подходы и примеры применения . . . . .	19
§ 1.3. Термодинамически обоснованные модели с «диффузной границей» . . . . .	20
§ 1.4. Модели гидродинамического типа . . . . .	22
§ 1.5. Модели с полным тензором напряжений . . . . .	25
§ 1.6. Методы построения термодинамически согласованных моделей . . . . .	30
<b>Глава 2. Многофазная модель с гиперупругим поведением фаз . . . . .</b>	<b>31</b>
§ 2.1. Основные обозначения . . . . .	33
§ 2.2. Вывод многофазной модели . . . . .	35
2.2.1. Основные определения и «геометрические» уравнения . . . . .	37
2.2.2. Основные уравнения . . . . .	41
2.2.3. Уравнения для объемной доли и вид обменного слагаемого для дис- торсии . . . . .	42
2.2.4. Энтروпийное неравенство . . . . .	47
2.2.5. Процедура Колмана-Нолла . . . . .	48
2.2.6. Замкнутая формулировка модели . . . . .	53
§ 2.3. Частные случаи . . . . .	56
2.3.1. Модели типа Баера-Нунциато с шаровым тензором напряжений . . . . .	56
Модель Baer [1] . . . . .	58
Модель Drew [2] . . . . .	58
Модель Coquel [3] . . . . .	58
Модель Kapilla [4] . . . . .	60
Модель Coquel [5, 6] . . . . .	60
Модель Muller [7] . . . . .	60
2.3.2. Модели с полным тензором напряжений . . . . .	61
Модель Годунова-Роменского . . . . .	61
Модель Favrie [8]. . . . .	62
§ 2.4. Заключение . . . . .	62
<b>Глава 3. Математические модели динамики многофазных сред . . . . .</b>	<b>63</b>
§ 3.1. Модель Годунова-Роменского . . . . .	63
3.1.1. Однородная модель . . . . .	64
3.1.2. Кусочно-однородная модель . . . . .	65
§ 3.2. Модель Баера-Нунциато . . . . .	66
<b>Глава 4. Вычислительные алгоритмы . . . . .</b>	<b>69</b>

§ 4.1. Разрывный метод Галёркина . . . . .	71
4.1.1. Разрывный метод Галеркина для неконсервативной системы гиперболических уравнений . . . . .	71
4.1.2. Алгоритм расщепления . . . . .	74
4.1.3. Алгоритм интегрирования однородной гиперболической системы уравнений . . . . .	75
4.1.4. Алгоритм расчета релаксационных слагаемых . . . . .	75
§ 4.2. Применение ограничителей в разрывном методе Галеркина . . . . .	77
4.2.1. Индикатор немонотонности . . . . .	79
4.2.2. Лимитер Криводоновой . . . . .	80
4.2.3. Лимитер WENO-S . . . . .	80
4.2.4. Лимитер, обеспечивающий положительность объемных долей и плотностей . . . . .	81
4.2.5. Комплексное лимитирование . . . . .	82
<b>Глава 5. Описание программной реализации . . . . .</b>	<b>84</b>
§ 5.1. Архитектура программного комплекса . . . . .	84
§ 5.2. DIMP-MULTIPHASE как часть программного комплекса . . . . .	85
<b>Глава 6. Результаты расчетов . . . . .</b>	<b>88</b>
§ 6.1. Расчеты для гиперупругих моделей . . . . .	88
6.1.1. Расчеты в рамках однородной модели . . . . .	88
§ 6.2. Результаты численных экспериментов для модели Баера-Нунциато . . . . .	93
6.2.1. Тестовые расчеты без релаксации . . . . .	93
6.2.2. Тестовые расчеты с релаксацией . . . . .	100
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>115</b>
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>117</b>

## Введение

**Актуальность темы 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.

Основной сложностью при описании динамики многофазных течений является подход к представлению межфазных границ. Разрывы физических полей, возникающих на границах, представляют большую трудность как для математической моделирования, так и для применяемых вычислительных методов и алгоритмов. Таким образом,

техника представления межфазных границ в модели является ключевым фактором. Кратко рассмотрим упрощенную классификацию по представлению межфазных границ для математических моделей, которые пригодны для описания динамики конденсированных сред со свободными границами раздела фаз. Под фазами будем понимать физически однородные области, являющейся частью гетерогенной системы, которые отделены друг от друга поверхностями разделов.

Модели динамики многофазных сред можно разделить на два больших класса: (а) модели с четкой границей, (б) модели с диффузной границей.

В рамках моделей с четкой границей поверхности раздела фаз представляют собой математические поверхности нулевой толщины, то есть достаточно гладкие многообразия коразмерности один во вмещающем среду пространстве. В каждой из фаз поведение системы описывается в рамках выбранной модели, при этом ее параметры и решения могут терпеть разрыв на межфазной границе. На границе между фазами должны быть заданы условия согласования, которые связывают между собой значения соответствующих величин по разные стороны от границы. Для описания динамики такой системы в общем случае необходимо уметь решать как уравнения в областях однородности (с учетом условий согласования), так и рассчитывать динамику границы раздела фаз. Таким образом, в общей системе уравнений появляются специфические уравнения, управляющие динамикой границ раздела сред, для решения которых должны применяться соответствующие вычислительные алгоритмы.

Серьезной проблемой при построении подобных моделей является тот факт, что в ходе своей эволюции границы раздела фаз могут претерпевать изменения, в том числе топологические. Типичным примером такой задачи является задача о взаимодействии пузыря газа, находящегося в жидкости, с распространяющейся по жидкости ударной волной (shock-bubble interaction problem) [9]. Известен целый ряд методов решения этой задачи. Исторически первыми из них являются методы, основанные на прямой трассировке точек границы. Эти методы сравнительно просты, однако, вообще говоря не позволяют рассматривать задачи, в которых границы могут претерпевать топологические превращения. По этой причине в последние десятилетия широкое распространение получили методы, основанные на неявном представлении границ. К таким методам относятся методы типа Volume of fluid [10, 11], множеств уровня [12] и его варианты (в частности, консервативный метод множеств уровня).

Модели с диффузной границей предполагают, 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, а входят в правые части уравнений, описывающих динамику среды. В содержательных постановках параметр порядка может являться, например, распределением концентрации определенной фазы в пространстве.

Можно выделить следующие преимущества моделей с диффузной границей. По сравнению с моделями с четкой границей достигается большая гибкость в выборе урав-

нений состояния. Более того, данный класс моделей является консервативным по массе, энергии и импульсу для смеси. Это приводит к точным вычислениям термодинамических потенциалов на межфазных границах. При этом модели данного типа допускают решение в рамках единого вычислительного алгоритма для всех групп уравнений. Помимо этого, как указано выше, в данных моделях межфазные границы могут создаваться и разрушаться в ходе эволюции. Модели с диффузной границей в большинстве важных случаев могут быть построены как термодинамически корректные.

**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 реалистичных 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 дина-

мики неоднородных сред с гиперупругим поведением фаз в дискретных постановках актуальных сеточных размерностей.

#### **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.

**Научная значимость и практическая ценность исследования** заключается в разработанных математических моделях, соответствующих вариантов алгоритмов разрывного метода Галеркина и параллельной программной реализации, пригодной для анализа задач в реалистичных постановках.

**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 столетием 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

**Публикации.** По теме работы опубликовано 11 печатных работ [13–23], 8 из которых в международных базах цитирования, 1 в сборниках докладов конференций и 2 в других изданиях.

**Содержание работы.** Во введении данной работы формулируются цели и задачи исследования, обосновывается актуальность и научная значимость работы.

В **первой главе** представлен краткий обзор существующих подходов к моделированию многофазных сред. В параграфе 1.4 приведены существующие модели и подходы для сред, в которых имеется только объемная деформация, т.е. тензор напряжений имеет диагональный вид. В параграфе 1.5 проведен обзор существующих моделей для динамики многофазных сред, содержащих полный тензор деформации.

Во **второй главе** в разделе 2.2 представлен вывод многофазной модели с учетом гиперупругого поведения фаз в рамках процедуры Колмана-Нолла. В разделе 2.3.1 рассмотрены возможные частные случаи представленной модели.

В **третьей главе** в разделе 3.1 представлена модель Годунова-Роменского для описания динамики упругого тела в эйлеровой постановке. В параграфе 3.1.1 описан общеизвестный однофазный вариант, содержащий только консервативные слагаемые и единственное уравнение состояния в расчетной области. В параграфе 3.1.2 вводится функция уровня, применяемая для взвешивания «фаз» в расчетной области. Приведена формулировка задачи для неоднородного случая гиперупругой модели Годунова-Роменского. Далее в главе представлена модель Баера-Нунциато для описания динамики многофазных сред. В разделе 3.2 представлена математическая модель Баера-Нунциато, описывающая поведение двухфазной среды, а также кратко дан обзор возможных замыкающих соотношений для полученной модели.

В **четвертой главе** представлена численная схема для системы гиперболических уравнений на основе разрывного метода Галеркина. В параграфе 4.1.1 описана общая схема для случая системы гиперболических уравнений, содержащих неконсервативные слагаемые, а также кратко описан способ введения обобщенного решения в случае разрывных коэффициентов в этих слагаемых. Помимо этого, в параграфе представлена общая схема для системы гиперболических уравнений, содержащих как консервативные, так и неконсервативные слагаемые, а также варианты численных потоков на основе метода Годунова для данной схемы. Далее в главе представлен алгоритм расщепления в параграфе 4.1.2, а также процедура интегрирования по времени с помощью метода Рунге-Кутты в параграфе 4.1.3. Далее представлен алгоритм расчета релаксационных слагаемых в параграфе 4.1.4. Далее в параграфе 4.2 описаны варианты ограничителей (лимитеров), применяемых в данной работе.



В **пятой главе** представлено описание программной реализации исследуемых математических моделей, а также соответствующих вычислительных 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 [24].

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 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. В разделе 6.1 представлены результаты расчетов для модели Годунова-Роменского. В параграфе 6.1.1 представлены результаты расчета однофазной однородной модели, приведены формулировки и данные тестовых расчетов. В параграфе 6.1.1 приведены тесты для упругой задачи, содержащей неоднородности и различные параметры уравнения состояния для каждой из «фаз». Далее представлен пример трехмерного расчета. В параграфе 6.2 представлены результаты расчета для тестов модели Баера-Нунциато без релаксации в параграфе 6.2.1 и с релаксацией в параграфе 6.2.2. Задачи включают в себя различные постановки, в том числе соответствующие экспериментальным данным.

В заключении сформулированы основные результаты работы и направления дальнейшего развития.

**Объем и структура работы.** Работа состоит из Введения, 6 глав и Заключения. Полный объем работы составляет 128 страниц, включая 21 рисунок и 7 таблиц. Список литературы содержит 137 наименований.

# Глава 1. Методы моделирования многофазных сред с разрешением межфазных границ

В настоящее время существует значительный интерес к разработке средств и методов математического моделирования для анализа высокоинтенсивных ударно-волновых процессов в неоднородных конденсированных средах (твердых телах и жидкостях), порождаемых интенсивными механическими и тепловыми нагрузками.

Традиционно, для решения таких задач используются модели, основанные на лагранжевом (материальном) описании среды. Их достоинством является возможность разработки эффективных вычислительных алгоритмов, в том числе при наличии больших перемещений и деформаций точек среды, и простота отслеживания границ раздела материалов с различными термодинамическими и реологическими свойствами, поскольку при лагранжевом описании границы раздела различных материалов не меняются.

Типичной проблемой таких методов в случае больших перемещений и деформаций среды является сильное возмущение расчетной сетки в эйлеровых координатах: в ходе расчета могут появляться ячейки, геометрия которых несовместна с моделью деформации среды. Например, в ходе расчета может возникать «перехлест» граней ячеек сетки (« $\square \rightarrow \bowtie$ ») или их вырождение (« $\square \rightarrow \Delta$ » и др.). Это привело к разработке методов на основе смешанного эйлерово-лагранжевого (СЭЛ, ALE — Arbitrary Lagrangian-Eulerian) способа описания среды. В этом случае для описания движения материальных точек среды и точек расчетной области (сетки) используется два параметризованных временем отображения из лагранжевых координат в эйлеровы, имеющих одинаковый образ лагранжевой области в эйлеровом пространстве. Одно из этих отображений описывает движение материальных точек среды, второе — движение расчетной сетки. Это позволяет, с одной стороны, избежать проблемы возмущений сетки в эйлеровых координатах, а с другой — формально сохранить все достоинства лагранжевого описания.

На основе этих подходов созданы такие коды, как Allegra [25] и его активно развиваемый современный аналог BLAST [26]. Отметим также коды HYDRA [27], LASNEX [28, 29], ICFP3 [30].

Использование смешанных эйлерово-лагранжевых переменных вызывает ряд технических сложностей, связанных с устойчивой реализацией соответствующего класса алгоритмов. Так, «узким» местом этих подходов являются алгоритмы генерации (перестройки) адаптивных сеток в ходе расчета и корректная переинтерполяция на них физических полей («remesh/remap»). В частности, значительное число работ, по-

священных развитию базового ядра кода Allegra посвящено именно этим вопросам и вопросам восстановления межфазных границ [31–35].

Одновременно с этими трудностями использования СЭЛ-подходов, они сложны для реализации в случаях, когда в модели присутствуют динамические границы (например, фазовых переходов или фронтов химических реакций и др., когда скорость движения фронта относительно материальных точек среды отлична от нуля), большое число несвязных подобластей (например, гранулированные среды), взаимодействие границ (упругий контакт), фрагментация среды (разлет «осколков») и так далее.

По этой причине в настоящее время для решения задач с «экстремальными» деформациями все большее значение приобретают методы, основанные на эйлеровом описании поведения среды. Одной из центральных проблем, связанных с применением моделей такого типа, является необходимость описания динамики межфазных границ (в том числе границ расчетной области). При этом использование чисто эйлеровых подходов позволяет успешно решать задачи с динамическими фронтами (фронты химических реакций, детонации, горения, фазовых переходов), учитывать поверхностные эффекты (при их наличии; например, поверхностное натяжение и др.) и фрагментацию среды, описывать процессы унифицированно в рамках единой системы уравнений для сред с существенно различными термодинамическими и механическими свойствами («твердое тело»/«газ») и т.д. Примеры эйлеровых подходов для решения указанных примеров задач приведены в, например, в [8, 36–41].

Дополнительные достоинства эйлеровых подходов проявляются при использовании реалистичных воксельных геометрических моделей среды. В моделях такого типа геометрия области и распределение свойств в ней задается трехмерным бинарным массивом, каждый элемент которого имеет значение «0» или «1». При этом области материала соответствует, например, значение «1», а ячейки со значениями «0» являются пустотами. Другими словами, в простейшем случае область расчета задается в виде трехмерной двухцветной «фотографии» образца материала, где один из цветов соответствует «фону», а второй — непосредственно «изображению». Актуальность воксельного представления геометрии расчетной области связана с тем, что для ряда искусственных и природных сред геометрия расчетной области не может быть охарактеризована точно (например, это касается геометрической структуры распределения фаз композиционного материала). Для построения геометрических моделей таких сред часто используют компьютерную микрофотографию.

При использовании воксельных геометрических моделей среды, их структура таких сред известна с конечной точностью (пространственным разрешением, который определяется шагом воксельной сетки). По этой причине точное представление границ между материалами или границ раздела фаз материала, или границ между различными материалами, характерное для лагранжевых методов, является избыточным. В таких условиях представление границы более естественно в рамках модели типа «диффузной границы», когда реальная граница заменяется «размазанной» на конечную толщину.

Примерами моделей многоматериальных (multimaterial) и многофазных сред, основанных на эйлеровом описании, являются модели гидродинамики суспензий или эмульсий с прямым разрешением структуры как дисперсной, так и диспергирующей сред (однородно по пространству описывается гидродинамическое течение в рамках модели Навье-Стокса при наличии в потоке множества частиц или капель, описываемых уравнениями теории упругости без явного разрешения их границ), моделирование ударного взаимодействия упругопластического ударника с преградой с образованием осколков при одновременном расчете порождаемого движением твердых тел газодинамического течения вокруг них.

Ценой такой общности является необходимость использования очень мелких эйлеровых расчетных сеток (в том числе адаптивных динамических [42]) и/или способов восполнения решения высокого порядка — прежде всего, для разрешения «тонкой» диффузной границы. Отчасти, эта проблема решается с помощью современной высокопроизводительной вычислительной техники [43].

Описанные выше достоинства и общность эйлеровых подходов делают перспективным их использование для решения сложных комплексных задач математического моделирования поведения многофазных сред при высокоинтенсивном и импульсном нагружении.

## § 1.1. Классификация моделей по способу разрешения границ

В настоящем разделе дается упрощенная классификация математических моделей и вычислительных алгоритмов, которые пригодны для описания динамики конденсированных сред со свободными (внутренними) границами раздела фаз. Под фазами будем понимать физически однородные области, являющейся частью гетерогенной системы, которые отделены друг от друга поверхностями разделов.

**Модели с «четкой» границей.** В этом случае поверхности раздела фаз представляют собой строго заданные границы, то есть 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. На границе между фазами должны быть заданы соответствующие условия согласования, которые связывают между собой значения соответствующих величин по разные стороны от границы. Для описания динамики такой системы в общем случае необходимо уметь решать как уравнения в областях однородности (с учетом условий согласования), так и рассчитывать динамику границы раздела фаз.

Существует целый ряд способов описания динамики границ, часть из которых описана ниже.

**Модели с «диффузной» границей.** Модели с диффузной границей предполагают, 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. Технически представление границы основано на том, что границей считается неявно заданная кривая или поверхность вида  $\phi = 1/2$ , где параметр порядка  $\phi$  является заданной в пространстве функцией, которая имеет вид сглаженной характеристической функций множества  $\Omega$ . В содержательных постановках параметр порядка может являться, например, распределением концентрации определенной фазы в пространстве. Применение такого подхода в рамках эйлеровых моделей не приводит к существенным сложностям.

Модели такого типа строятся одним из двух способов.

1. В соответствии с первым способом действующие на границе раздела фаз поверхностные силы *формально* добавляются в правую часть системы динамических уравнений с использованием отнесенной к поверхности раздела фаз меры Дирака («поверхностной» дельта-функции). Далее строится аппроксимация указанной меры Дирака подходящей дельтаобразной последовательностью с носителем конечной меры. Ширина «размывания» меры Дирака обычно является параметром модели. При его стремлении к нулю регуляризованная таким образом модель «сходится» к исходной модели с четкой границей. В качестве примера приведем методы типа CST — Continuous Surface Tension или CSF — Continuous Surface Force для расчета (многофазных) течений эмульсий [44]. Зачастую такие подходы приводят к построению удобных для численной реализации моделей, которые, тем не менее, не всегда являются термодинамически согласованными и не обеспечивают выполнение фундаментальных законов термодинамики (в частности, неравенства Клаузиуса-Дюгема, которое является формулировкой второго закона термодинамики [45–47]).
2. Второй способ построения реализуется в рамках так называемой слабонелокальной термодинамики, которая допускает, что описывающие состояние среды термодинамические потенциалы зависят не только от значений параметров состояния системы, но и от их градиентов. Такие модели являются термодинамически согласованными и получают все большее распространение в настоящее время. В частности, они широко применяются при расчете многофазных течений с учетом границ раздела фаз и поверхностных эффектов [48].

Важно отметить, что первый способ построения моделей является, скорее, промежуточным шагом при построении удобных в использовании и реализации численных аппроксимаций задачи. В то же время модели второго типа являются физически обоснованными моделями сплошной среды и удовлетворяют всем необходимым условиям

и ограничениям термодинамического характера и широко изучаются, в том числе, вне контекста численного моделирования.

## § 1.2. Модели «четкой границы»

Рассматриваемый класс задач относится к динамике многофазных сред, в которых фазы занимают собственную часть пространства и разделены границами. Термодинамические свойства фаз, вообще говоря, различны. В частности, они могут описываться различными уравнениями состояния и релогическими соотношениями, например, в системах «жидкость»/«газ», «жидкость»/«газ»/ «твердое тело» и других. В ходе эволюции системы границы раздела фаз могут претерпевать изменения, в том числе топологические. Типичным примером такой задачи является задача о взаимодействии пузыря газа, находящегося в жидкости, с распространяющейся по жидкости ударной волной.

Основная сложность решения таких задач связана с тем, что поведение фаз может описываться различными уравнениями состояния и реологическими соотношениями (при этом общая форма уравнений сохраняется — динамика фаз описывается фундаментальными законами сохранения массы, энергии и импульса), а форма межфазных границ заранее неизвестна и определяется как часть решения задачи.

Одним из способов решения таких задач являются методы, основанные на лагранжевом или смешанном эйлерово-лагранжевом описании среды. Их достоинства и недостатки уже были рассмотрены выше. Отметим только, что эффективность их применения обусловлена тем фактом, что границы областей, занятых фазами, не меняются в лагранжевых координатах.

Далее будут рассмотрены только методы, основанные на эйлеровом представлении движения среды. При этом основной интерес представляют методы, позволяющие моделировать эволюцию системы методом сквозного счета, то есть унифицированно по всем пространственным ячейкам расчетной области, — без явной аппроксимации границ раздела фаз сеткой и явного использования условий согласования между состояниями фаз при переходе через границы.

Принципиально такие методы можно разделить на два больших класса.

К первому относятся истинно «однородные» подходы, основанные, например, на моделях типа диффузной границы. В этом случае сам термин «граница» является условным — по существу модель не оперирует такой сущностью. Толщина диффузной границы при этом является физическим параметром и должна разрешаться расчетной сеткой. Такие модели будут рассмотрены в последующих разделах.

Ко второму классу методов относятся методы, предполагающие наличие границ в классическом смысле этого слова — как многообразий коразмерности один во вмещающем фазу пространстве, но допускающие удобную с практической точки зрения реализацию, которая не предполагает явное описание эволюции границы.

Принципиальной сложностью, с которой сталкивается применение таких методов, является способ описания эволюции границ между фазами на неподвижной эйлеровой расчетной сетке. Принципиально можно выделить два основных метода:

- методы, основанные на непосредственном отслеживании конфигурации границы области (interface tracking);
- методы, основанные на неявном описании границы (interace capturing).

Методы первого типа далее рассматриваться не будут [49].

В рамках подходов второго типа будут рассмотрены два наиболее распространенных класса методов представления границы: Volume of Fluid (VoF) и Level Set Method (метод поверхностей уровня). Опишем кратко основные идеи этих методов как наиболее популярных.

### 1.2.1. Представлении поверхности в рамках подхода Volume of Fluid

Изначально метод был предложен в работах К. Хирта (C. Hirt) [10]. В дальнейшем метод получил широкое распространение и является наравне с Ghost Fluid Method одним из самых распространенных в своем классе.

Представим себе, что в момент времени  $t$  фаза  $\alpha$  занимает ограниченную область пространства  $\Omega_\alpha = \Omega_\alpha(t)$ . Дополнение к этой области занято второй фазой (случай более чем двух фаз возможен, но не будет рассматриваться, так как цель настоящего раздела — описание основных идей соответствующего метода). Рассмотрим характеристическую функцию  $\xi_\alpha = \xi_\alpha(\mathbf{x}, t)$  области  $\Omega_\alpha$ , равную единице внутри нее и нулю — снаружи. В ходе эволюции состояния (течения) среды указанный объем и его граница деформируется. Вместе с этим меняется и носитель соответствующей характеристической функции. Указанная характеристическая функция определена в каждой точке пространства и ее эволюция при известном пространственном распределении скорости среды может быть описана подходящим уравнением переноса (как для пассивного скаляра).

Методы типа VoF основаны на дискретизации указанной характеристической функции с использованием подходящей (обычно — декартовой) расчетной сетки. При этом в соответствие каждой расчетной ячейке ставится число, равное отношению объема ячейки, расположенной целиком внутри фазы (то есть части ячейки, где характеристическая функция равна единице) ко всему объему ячейки, то есть для ячейки сетки  $\omega$  имеем  $\xi_\alpha(\omega) = \text{meas}(\Omega_\alpha \cap \omega) / \text{meas} \omega$ . Соответствующую сеточную функцию будем обозначать как  $\xi_\alpha^h$ . Такая сеточная функция равна 1 и 0 в ячейках расположенных внутри и снаружи области  $\Omega_\alpha$  занятой фазой  $\alpha$  и принимает значение от 0 до 1 в тех ячейках, которые имеют непустое пересечение с границей области  $\Omega_\alpha$ . Такую сеточную функцию можно условно интерпретировать как объемную концентрацию фазы, — однако нужно понимать, что соответствующая математическая модель предполагает наличие четкой

границы (то есть фазы не смешиваются) и соответствующая сеточной «концентрации» физическая концентрация принимает всего два значения (ноль и единица).

Метод VoF основан на следующей идее: вместо описания эволюции области фазы и ее границы рассматривается уравнение для эволюции указанной сеточной «концентрации». Это уравнение аппроксимируется на расчетной сетке совместно с другими уравнениями модели течения. Алгоритм метода VoF, упрощенно, имеет следующий вид.

Пусть состояние среды и распределение фазы, описываемой сеточной функцией  $\xi_\alpha^h$  в текущий момент времени  $t$  задано. Для определения решения на очередном шаге по времени производятся следующие действия:

1. Определяется «новое» распределение  $\xi_\alpha^h$  в момент времени  $t + \Delta t$ . Для этого численно интегрируется соответствующее эволюционное уравнение переноса относительно  $\xi_\alpha^h$ .
2. По полученным значениям  $\xi_\alpha^h$  восстанавливается, тем или иным способом, форма границы области, занятой фазой — напомним, что данная модель предполагает наличие «четкой» границы, поэтому в каждой точке пространства (и каждой точке ячейки сетки) может находиться лишь одна фаза — «смешанное» состояние с отличными от нуля и единицы значениями «концентрациями» *математическая модель* не допускает. Таким образом, на данном шаге алгоритма строится определенная в каждой точке пространства характеристическая функция области, занятой фазой и аппроксимация границы области, занятой фазой. Построенная (восстановленная) функция принимает только значения 0 и 1.
3. Далее, с учетом восстановленной формы границы строятся аппроксимации задачи — вообще говоря, любым удобным способом. Восстановленная на предыдущем шаге область фазы и ее граница используется для корректного вычисления численных потоков для консервативных величин.

Характерным свойством методов типа VoF является конкретный (описанный выше) способ представления области фазы. Различные варианты методов этого типа отличаются способом восстановления четкой границы по распределению  $\xi_\alpha^h$  и способов аппроксимации уравнений задачи в ячейках, которые имеют непустое пересечение с границей фазы.

Одними из основных сложностей метода являются:

- Необходимость поддержания в ходе расчета как можно более узкой зоны ячеек, в которых «концентрации» фаз отличны от 0 и 1. Это достигается либо модификацией уравнения, описывающего эволюции характеристической функции (например, путем добавления подходящих слагаемых, компенсирующих эффекты численной диффузии), либо использованием специальных алгоритмов [50], основанных на априорной информации о том, что точное решение задачи может



принимать всего два значения — 0 и 1, а ширина переходной зоны между этими состояниями должна быть минимальной при фиксированной сетке — то есть иметь, в идеальном случае, толщину не более чем в одну ячейку сетки.

- В ряде задач (например, гидродинамика несжимаемой жидкости) объем фазы не меняется. Таким образом, аппроксимации уравнения, описывающего эволюции функции  $\xi_\alpha^h$  должны быть консервативными. В противном случае объем «восстановленной» области должен отвечать балансу объема в системе.
- Как показывает практика, для корректного применения метода чрезвычайно важен способ восстановления геометрии области и пространственного распределения фазы в пределах ячеек расчетной сетки. В настоящее время известен целый ряд таких методов [51]. Помимо этого, во многих случаях (например, при расчете течений с учетом поверхностного натяжения) крайне важным является учет локальных геометрических характеристик границы фазы, в частности, кривизны границы и поля нормалей к границе в ее окрестности.

### 1.2.2. Метод множеств уровня(level-set method)

В данном разделе будет детально описан метод поверхностей уровня в двух вариантах — консервативном и неконсервативном. Этот метод ([52]) является одним из самых распространенных способов описания эволюции границ областей.

В рамках этого метода граница между фазами представлена неявно. Для ее описания используется функция расстояния (distance function)  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , которую мы будем называть *функцией уровня*. Данная функция ставит в соответствие каждой точке пространства ее расстояние до границы. Таким образом, она равна нулю только в точках границы. Для того, чтобы отличать фазы друг от друга, вводится в рассмотрение знаковая функция, являющаяся положительной в одной области и отрицательной - в другой.

Уравнение переноса функции уровня  $\phi$  имеет вид:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = 0, \quad (1.1)$$

где  $\mathbf{u}$  — заданное поле скоростей. Вместе с распределением функции  $\phi$  в начальный момент времени и  $\mathbf{u}$  уравнение (1.1) описывает эволюцию распределения функции уровня в пространстве. Существенной особенностью данного подхода является возможность решать уравнение (1.1) независимо от основной системы уравнений, поскольку поле скоростей предполагается заранее известным.

Такая функция корректно определена и является гладкой по крайней мере в небольшой окрестности границы, а в остальных точках расчетной области ее значение зачастую неважно (в таком случае говорят о методе «narrow band level set method», [53])). Тем не менее, в общем случае поле скоростей  $\mathbf{u}$  задано неравномерно во всей

области, а уравнение (1.1) решается приближенно. Это приводит к тому, что функция уровня перестает быть знаковой функцией расстояния даже в окрестности границы.

По этим причинам процедура численного решения уравнения (1.1) сопровождается процедурой переинициализации [54], в ходе которой восстанавливаются соответствующие свойства функции  $\phi$ . Эта процедура заключается в решении уравнения

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + S(|\nabla \phi| - 1) = 0 \quad (1.2)$$

где  $\tau$  — временеподобный параметр («псевдовремя»),  $S$  — знаковая функция для  $\phi_0$ . Стационарное состояние соответствует ситуации  $\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = 0$  и достигается тогда и только тогда, когда  $|\nabla \phi| = 1$ . В этом случае функция уровня снова становится линейной знаковой функцией расстояния.

При задании гладкой границы в ячейках сетки могут возникать *смешанные* состояния. Из-за того, что при эволюции фаз в каждой ячейке решаются уравнения только для одной из фаз, гладкая межфазная граница фактически переходит в границу между расчетными ячейками. Данный эффект получил название *staircasing* и хорошо исследован в ряде работ. В результате этого эффекта параметры фаз некорректно используются при расчете потоков вдоль границ ячеек, что приводит, в свою очередь, к вычислительным ошибкам и нефизическим осцилляциям.

Одним из способов преодоления этих трудностей является «сглаживание» межфазной границы какой-либо гладкой функцией таким образом, чтобы возникла переходная область между фазами. Как указывалось в начале параграфа, данный подход не является термодинамически согласованным и не имеет физического обоснования, однако позволяет построить устойчивый алгоритм для вычисления процессов в «многофазных» моделях. Отметим также, что, как правило, для взвешивания параметров используется сглаженная функция Хевисайда.

Существует также принципиально иной способ избежать данных ошибок, который наиболее распространен в задачах гидродинамики сжимаемых сред. Он получил название *Ghost Fluid Methods (GFM)*.

Для построения аппроксимаций уравнений модели в рамках этого метода рассматривается следующая схема решения. Считается, что каждой фазе соответствует некоторая фиктивная фаза, заполняющая, формально, всю расчетную область. Состояние этой фазы определяется тем же самым набором переменных, что и состояние реальной, физической, фазы. В области, занятой фазой, ее состояние совпадает для реальной и фиктивной фазы. Расчет нового состояния фазы во внутренних ячейках области, которую она занимает, осуществляется на основе подходящей (например, конечнообъемной) разностной схемы. При этом требуются значения параметров течения в фиктивных ячейках. Эти значения с определяются с помощью специального алгоритма. В простейшем случае состояние в фиктивных ячейках в окрестности границы фаз строится путем сноса (в соответствии с заданным полем скорости) значений из ячеек в области фазы. Точно так же происходит расчет состояния второй фазы.

### 1.2.3. Другие подходы и примеры применения

Указанные выше подходы могут быть применены не только в том случае, когда фазы являются жидкими и газообразными, но и в ситуациях, когда одна из фаз является деформированным твердым телом, а вторая — жидкостью или газом.

Коротко опишем характерные работы в этом направлении.

**«Гидродинамические» многоматериальные модели.** Под такими моделями будем понимать модели, в которых фазы деформируются как жидкости или газы. 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

В работах [55–57] описывается разработанный авторами подход FVCF-NIP (Finite volume with Characteristic Flux-Natural Interface Position) для расчета многоматериальных гидродинамических течений. Учет динамики границ осуществляется в рамках предложенного авторами метода NIP (Natural Interface Position), который предполагает описание границы раздела фаз как разрывной кусочно-линейной линией или поверхностью. Способ учета отличается от распространенных методов типа VoF или Ghost Fluid. По мнению авторов подхода, он устраняет часть недостатков традиционных методов на основе методов поверхностей уровня, в частности, неточность методов, связанную с наличием «смешанных» ячеек (то есть ячеек, в которых одновременно присутствует две фазы). Помимо этого, метод естественным образом позволяет учитывать условия проскальзывания на границах раздела фаз, что представляет собой определенную проблему для ранее предложенных алгоритмов на основе методов типа VoF или Ghost Fluid.

**«Упругие» и «смешанные» многоматериальные модели.** Под такими моделями будем понимать 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.

В цикле работ [58–60] предлагается метод решения многоматериальных задач с применением метода множеств уровня для описания динамики границ раздела фаз. Все фазы рассматриваются как твердые тела, в качестве модели твердого тела рассматриваются гиперупругие модели и их упругопластические обобщения. Значительная часть этих работ посвящена вопросам разработки методов решения гиперупругих задач, в частности, рассматриваются вопросы построения численных потоков типа HLLC для гиперупругих задач. Предложены варианты метода, которые позволяют описывать условия скольжения на контактных (межфазных) границах. Для описания динамики межфазных границ используется вариант метода Ghost Fluid.

В работах [61] описывается метод решения многоматериальных задач, в котором фазы могут быть как жидкими или газообразными, так и твердыми телами. Предлагается однородная по способу описания среды разностная схема. Подход позволяет описывать условия скольжения без трения. Для описания деформации *всех* фаз используется тензор дисторсии (тензор градиента деформации). Для описания динамики границы раздела фаз использует метод множеств уровня. Высокий порядок метода обеспечивается применением схем типа WENO.

В работе [62] предложен подход, в котором для описания движения жидкой или газообразной среды используется многокомпонентной моделью, твердые тела описываются гиперболической моделью гиперупругости. Для описания динамики границ применяется метод множеств уровня. Для расчета численных потоков и состояния в «смешанных» ячейках используется решение смешанной (относительно состояний) задачи Римана о распаде разрыва.

### § 1.3. Термодинамически обоснованные модели с «диффузной границей»

Ниже будем говорить о подходах, в которых идея применения метода «диффузной границы» заложена на уровне математической модели, безотносительно используемого численного алгоритма.

В рассмотренных в предыдущем разделе моделях граница раздела фаз являлась математической поверхностью «нулевой толщины». В обсуждаемом в настоящем разделе классе моделей используется иной способ формализации понятия «граница», а именно, считается, что она представляет собой зону («слой») конечной толщины, в пределах которой свойства среды и параметры течения изменяются непрерывно, но быстро. Конечная толщина границы здесь является параметром математической модели, а не дефектом разностной схемы.

В зависимости от ситуации в математической модели этого класса могут как учитываться, так и не учитываться слагаемые, обеспечивающие конечную и заданную толщину диффузной границы в ходе эволюции системы.

К первому классу моделей относятся, например, гидродинамические модели многофазной жидкости с несмешивающимися фазами с учетом эффекта разделения фаз и поверхностного натяжения. В уравнениях этих моделей входят (необходимо нелинейные) диффузионные и антидиффузионные слагаемые, которые препятствуют увеличению или уменьшению толщины диффузной границы относительно ее равновесной толщины, которая является параметром модели.

В уравнения моделей второго типа такие слагаемые не входят, однако, обычно, структура и свойства уравнений модели таковы, что толщина диффузной границы не может измениться за счет физических эффектов (характерные времена моделирования существенно больше времени «размазывания» границы). Такая ситуация возникает,

когда диффузная граница соответствует контактному разрыву, в окрестности которого скорость течения непрерывна и слабо меняется в зависимости от точки пространства. В этом случае в расчетах увеличение толщины границы может наблюдаться например, за счет эффектов численной диссипации.

Четкого разделения между моделями описанных двух типов нет: в обоих случаях в них, вообще говоря, должны присутствовать физические механизмы, обеспечивающие заданное равновесное состояние границы. Однако во многих задачах нет необходимости учитывать все внутренние силы, действующие в системе. Описанные выше модели первого типа (например, модели гидродинамики с фазовым полем, или, что то же самое, модели слабонелокальной, или градиентной, гидродинамики) предполагают что поверхностные силы сравнимы по величине с вязкими силами и силами инерции. В известных авторам моделях второго типа априорно предполагается, что силы инерции существенно выше сил поверхностного натяжения — поэтому последние можно не учитывать. Такие ситуации обычно возникают в задачах физики взрыва и удара, то есть быстропротекающих процессов. Как следствие, за интересующие исследователя времена схемная диссипация зачастую не успевает существенно увеличить ширину границы. Даже если это происходит, существуют способы коррекции ширины границы, существенно более простые, чем прямой учет физической модели разделения фаз.

Заметим также следующее. Для описания движения среды в случае больших пространственных перемещений и деформаций может применяться как эйлеровый (пространственный), так и лагранжевый (материальный) способ описания движения среды. При использовании методов типа «четкой границы» ее толщина будет являться нулевой при обоих способах описания (в силу того, что движение среды, понимаемое как *гладкое отображение* отсчетной конфигурации в актуальную) отображает поверхность в поверхность. В случае методов «диффузной границы» ситуация иная. А именно, фиксированная ширина диффузной границы в лагранжевых координатах может изменяться в пространстве за счет деформации среды в направлении нормали к границе и, теоретически, быть «очень большой». Очевидно, что справедливо и обратное: сравнительно маленькая толщина границы в эйлеровых координатах может быть сравнительно большой в лагранжевых. Обычно, по факту, в моделях, предполагающих эйлеров способ описания движения среды требуется, чтобы толщина границы была «маленькой» в эйлеровых координатах в любом состоянии среды (впрочем, явно, на этапе обсуждения математической модели, это обычно не постулируется).

Основой построения моделей многофазных сред типа «диффузной границы» в контексте данной работы является теория многоскоростного многофазного континуума, изложенная в [63]

Фундамент этой теории был заложен, по всей видимости, задолго до практического применения подобных моделей, в работе Х.А. Рахматулина [64].

В общем случае, в рамках этих моделей, каждая фаза имеет свою собственную скорость (то есть, среда является многоскоростной) и свой набор термодинамических

параметров (таких как плотность, температура, давление, энергия и так далее). Помимо этого в состав уравнений модели входят дополнительные уравнения для изменения объемной концентрации фаз. Для многофазных однокомпонентных или многокомпонентных сред (в отличие от однофазных многокомпонентных) эти уравнения не следуют из закона сохранения массы компонент и являются независимыми уравнениями модели.

При построении математической модели среды возникают, прежде всего, два основных (с точки зрения дальнейшего изложения) вопроса, способ разрешения которых позволяет провести важную для дальнейшего изложения классификацию моделей:

1. Определения/задание «степени неравновесности» фаз. Другими словами, формулировка приемлемых для рассматриваемой модели условий равновесия фаз по кинематическим и термодинамическим параметрам — скоростям, давлениям, температурам фаз и так далее. Например, модель может быть равновесной по скорости и температуре (то есть скорости фаз и их температуры совпадают), но неравновесной по давлению (то есть давления фаз не равны между собой).
2. Определение/задание условий совместного деформирования фаз [63]. Другими словами, формулировка закона, который связывает деформации отдельных фаз и деформацию среды «в целом».

В контексте задач гидродинамики (то есть задач, в которых внутренняя энергия зависит лишь от одного инварианта тензора градиента деформации, определяющего изменение объема) второй вопрос является тривиальным, и основное направление работ связано с решением 1-го вопроса (далее будет пояснено, в каком смысле). Эти работы развиваются по настоящее время начиная с фундаментальной работы Баера и Нунциато [1].

Основной проблемой при построении моделей многофазных сред, в которых одна или несколько фаз могут быть «твердыми» (то есть описываться уравнениями состояния, зависящими от всех трех инвариантов тензора градиента деформации, например, модели гиперупругих материалов), основной проблемой является вопрос 2 (вопрос 1 при их построении, впрочем, не теряет актуальности). Такие модели были построены лишь в последние десятилетия и в настоящее время активно развиваются.

Ниже рассмотрим эти классы моделей, обращая внимание на особенности их вывода и основные сложности, возникающие при их применении и анализе.

## § 1.4. Модели гидродинамического типа

Под моделями гидродинамического типа будем понимать такие, в которых тензор напряжения среды является шаровым. Такое допущение обычно соответствует определению среды как «жидкой» >. Одной из наиболее популярных моделей такого класса является модель Баера-Нунциато. ее обобщения и частные случаи.

Сначала рассмотрим модели типа Баера и Нунциато, а также их редуцированные версии. Подробный обзор этого класса моделей приводится в работе [39]. В первой из них рассматривается их общий анализ, вопросы их обоснования и применения на практике. Основным приложением является анализ многофазных однокомпонентных течений применительно к расчету систем охлаждения атомных реакторов.

**Полностью неравновесная модель.** В общем случае, в рамках моделей динамики многофазных сред, каждая фаза имеет свою собственную скорость (то есть, среда является многоскоростной) и свой набор термодинамических параметров (таких как плотность, температура, давление, энергия и так далее). Помимо этого в систему уравнений модели входят дополнительные уравнения для изменения объемной концентрации фаз. Для многофазных однокомпонентных или многокомпонентных сред (в отличие от однофазных многокомпонентных) эти уравнения не следуют из закона сохранения массы компонент и являются независимыми уравнениями модели.

В зависимости от ситуации в математической модели этого класса могут как учитываться, так и не учитываться слагаемые, обеспечивающие конечную и заданную толщину диффузной границы в ходе эволюции системы. К первому классу моделей относятся, например, гидродинамические модели многофазной жидкости с несмешивающимися фазами с учетом эффекта разделения фаз и поверхностного натяжения [65]. В уравнениях этих моделей входят (необходимо нелинейные) диффузионные и антидиффузионные слагаемые, которые препятствуют увеличению или уменьшению толщины диффузной границы относительно ее равновесной толщины, которая является параметром модели. В уравнениях моделей второго типа такие слагаемые не входят, однако, обычно, структура и свойства уравнений модели таковы, что толщина диффузной границы не может измениться за счет физических эффектов (характерные времена моделирования существенно больше времени «размазывания» границы). Такая ситуация возникает, когда диффузная граница соответствует контактному разрыву, в окрестности которого скорость течения непрерывна и слабо меняется в зависимости от точки пространства. В этом случае в расчетах увеличение толщины границы может наблюдаться например, за счет эффектов численной диссипации.

Основой построения моделей многофазных моделей с «диффузной границей» в контексте данной работы является теория многоскоростного многофазного континуума в виде, изложенном, например, в [66]. Фундамент этой теории был заложен, по всей видимости, задолго до практического применения подобных моделей, в работе Х. А. Рахматулина [64].

Наиболее общей моделью рассматриваемого класса является полностью неравновесная модель Баера-Нунциато, состоящая из 7 уравнений для каждой фазы [1]. Данная модель может включать в себя дополнительные нелинейные члены, которые позволяют учитывать эффект разделения фаз, обеспечивающий постоянную равновесную толщину межфазной границы.

В рамках модели Баера-Нунциато каждая фаза обладает собственной скоростью, давлением, температурой и т.д. Модель включает в себя 1 уравнение для объемной доли одной из фаз, по уравнению для массы каждой из фаз, по 3 уравнения для импульсов каждой из фаз, по уравнению для энергии каждой из фаз. С помощью введения релаксационных слагаемых в правые части уравнений могут быть получены равновесные по определенным параметрам модели. Таким образом, рассмотрение релаксационных слагаемых расширяет возможные варианты применения модели. При наличии релаксационных слагаемых можно построить асимптотические решения при стремлении времени релаксации к нулю. Таким образом можно построить равновесные модели с уменьшенным числом уравнений. Эти модели можно описать следующим образом.

**Модель, равновесная по скорости.** Для каждой фазы решается 6 уравнений. Модель построена в работе [4] при устремлении времени релаксации по скорости к нулю. Модель состоит из 1 уравнения для объемной доли одной из фаз, 2 уравнений для массы каждой из фаз, 3 уравнений для импульса смеси и из 2 уравнений для энергии каждой из фаз. Вычислительные алгоритмы и исследования для данной модели проведены в работе [39].

**Модель, равновесная по скорости и давлению.** Модель рассмотрена в работах [4, 67, 68] и получается при устремлении времени релаксации по времени и давлению к нулю. Модель состоит из 1 уравнения для объемной доли одной из фаз, 2 уравнений для массы каждой из фаз, 3 уравнений для импульса смеси и 1 уравнения для энергии смеси.

**Модель, равновесная по скорости, давлению и температуре.** Данная модель представляет собой систему уравнений Эйлера с реактивными слагаемыми для одной фазы [4].

**Модель, равновесная по скорости, давлению, температуре и энергии Гиббса (химическому потенциалу).** Данная модель представляет собой классическую систему уравнений газовой динамики (уравнения Эйлера) [4].

Представленный в данной работе вариант модели Баера-Нунциато с 7 уравнениями является одним из многих вариантов. Известен целый ряд других способов построения таких моделей, которые отличаются способом замыкания описанной системы в смысле задания «интерфейсных» значений ( $P_I$ ,  $\mathbf{u}_I$  и так далее) в зависимости от параметров фаз [69]. Известен также целый ряд работ, посвященных теоретическому анализу того, каким образом может выглядеть замыкание, обеспечивающие гиперболичность и термодинамическую согласованность результирующей математической модели [70, 71].

Отметим следующие важные свойства полностью неравновесной модели Баера-Нунциато:



- модель является неравновесной: скорости, давления и температуры фаз отличны;
- замыкающие соотношения представляют собой уравнения состояния для каждой фазы и выражения для «интерфейсных» параметров;
- являясь неравновесной, модель не содержит уравнений иных, отличных от указанных выше, алгебраических замыкающих соотношений, в частности, уравнения состояния для смеси.

«Проблема замыкания», то есть разработка термодинамически непротиворечивого способа вычисления параметров модели с мгновенной релаксацией и численная реализация этой процедуры является темой большого количества теоретических и прикладных работ [72].

## § 1.5. Модели с полным тензором напряжений

В этом разделе будут обсуждаться модели, в которых деформация среды отличается от чисто объемной (как у жидкостей и газов). Основной проблемой при их построении является описание условий совместного деформирования фаз. В рассмотренных выше «гидродинамических» моделях деформация смеси сводится к изменению ее объема, который равен сумме объемов отдельных составляющих систему фаз. По существу, эти условия деформирования выражаются соотношением

$$\sum_{k=1}^N \alpha_k = 1,$$

где, как и ранее,  $\alpha_k$  — объемные концентрации фаз,  $N$  — число фаз. Другими словами, условия совместного деформирования для жидкостей и газов имеют формулировку «объем многофазной системы равен объему составляющих ее фаз».

Для ясности будет далее ориентироваться на случай двух фаз, причем одна из них является газообразной или жидкой, а вторая — упругим телом. Деформация последнего включает в себя объемную деформацию, однако она не полностью характеризует деформацию среды. Рассмотрим модели, использующий единый тензор дисторсии (или его эквивалент) для описания поведения многофазной смеси.

**Модели с одной мерой деформации.** В работе [73] предложена математическая модель двухфазной среды, в которой одна из фаз является гиперупругой, а вторая — жидкостью или газом. Модель является изоэнтропической и предполагает, что в каждой точке пространства находятся обе фазы, каждая из которых описывается своим набором параметров состояния, такими как скорость фазы и ее плотность. Модель включает в себя: уравнения закона сохранения массы для фаз (для каждой фазы); уравнения закона сохранения импульса (для каждой фазы); уравнение закона сохранения массы для смеси; уравнение для тензора дисторсии смеси; уравнение для относительной скорости

движения фаз. Состояние среды описывается заданием внутренней энергии смеси, которое имеет вид:

$$U = c_1 \mathcal{U}_1(\rho_1, \mathbf{G}) + c_2 \mathcal{U}_2(\rho_2) + \frac{1}{2} c_1 c_2 \mathbf{w}^2,$$

где  $c_{1,2}$  – массовая концентрация фаз (фаза «1» соответствует гиперупругому телу),  $\rho_{1,2}$  – плотности фаз,  $\mathbf{w} = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2$  – относительная скорость фаз.

Другая модель, использующая заданный для многофазной смеси тензор дилатации предложена в работе [74]. Построенная модель является неизотермической и включает в себя: уравнения закона сохранения массы для фаз (по числу фаз); уравнения закона сохранения импульса для смеси; уравнение закона сохранения энергии для смеси; уравнение для обратного тензора градиента деформации смеси. Последнее уравнение эквивалентно динамическим условиям совместности деформаций. Замыкание модели, таким образом, имеет вид уравнения состояния для смеси фаз и требует определения ряда параметров смеси (в частности, сдвиговых модулей и параметров «газодинамической» части уравнения состояния; используется жесткое уравнение состояния идеального газа, для него взвешивание может быть проведено точно – однако в общем случае точное выражение энергии для смеси не может быть получено аналогично сходной и обсуждаемой выше ситуации для модели Капиллы). Одновременно с этим, в уравнения состояния не входят слагаемые, которые бы «выделяли» зоны однородности, как в ранее описанной модели, что может представлять собой определенную проблему для материалов со сложным поведением – так как модель страдает «проблемой замыкания». В этой же работе приведены результаты численных расчетов, в которых сравниваются применение описанной модели с моделью тех же авторов, включающей в себя уравнения динамических условий совместности деформаций по числу фаз. Мотивация описанной работы – сокращение числа уравнений в системе. Модель приводится для произвольного числа фаз, число скалярных уравнений модели равняется  $N_f + 13$ , где  $N_f$  – число фаз (материалов). В двухфазном случае она включает в себя 15 уравнений (по числу уравнений однофазной гиперупругости плюс число фаз). Рассматриваемая модель является равновесной по температуре и давлению.

**Модели с несколькими мерами деформации.** В целом ряде работ предлагались многофазные модели, в которых число геометрических уравнений (динамических условий совместности деформаций) совпадает числом фаз.

В работах [74, 75] рассматривается модель, которая включает в себя: уравнения закона сохранения массы для фаз (по числу фаз); уравнения закона сохранения импульса для смеси; уравнение закона сохранения энергии для смеси; уравнение для обратного тензора градиента деформации фаз (по числу фаз) смеси.

В силу того, что деформация каждой фазы описывается «своим» тензором градиента деформации, внутренняя энергия система может быть задана как взвешенная по массовым концентрациям энергия отдельных фаз, каждое из которых представляет

собой зависимость от «собственных» переменных фазы. По этой причине, в этой модели проблема замыкания не возникает. Выражения для внутренней энергии получены термодинамически согласованным способом, который аналогичен представленному в работе [41].

Модель приводится для произвольного числа фаз, число скалярных уравнений модели равняется  $10N_f + 4$ , где  $N_f$  – число фаз (материалов). В двухфазном случае она включает в себя 24 уравнения. Рассматриваемая модель является равновесной по температуре и давлению.

В работе [74] предложена модель, которая включает в себя: уравнения закона сохранения массы для фаз (по числу фаз); уравнения для объемной концентрации фаз (по числу фаз); уравнения закона сохранения импульса для смеси; уравнение закона сохранения энергии для смеси; уравнение баланса внутренней энергии для фаз (по числу фаз); уравнение для обратного тензора градиента деформации для фаз (по числу фаз). Модель включает в себя  $12N + 4$  уравнения, в двухфазном случае число уравнений равно 28. Модель является неравновесной по температуре и давлению фаз. Уравнения состояния записываются для каждой фазы.

Одна из первых многофазных моделей, в которых одна из фаз является твердой, а вторая — газообразной, была предложена в работе [8]. Модель является двухфазной. Уравнения модели включают в себя: уравнения закона сохранения массы для фаз (по числу фаз); уравнения для объемной концентрации твердой фазы фаз; уравнения закона сохранения импульса для смеси; уравнение закона сохранения энергии для смеси; уравнение баланса внутренней энергии для фаз (по числу фаз); уравнение для тензора градиента деформации для одной из фаз (твердой). Особенностью работы является введение в рассмотрение, как независимой переменной, тензора градиента деформации для твердой фазы (с учетом объемной доли твердой фазы в многофазной смеси). Тензор дисторсии для второй фазы и для смеси не вводится, равно как и уравнения для этих величин не вводятся. Таким образом, непосредственно на уровне математической модели заложено, что одна из фаз может быть только газом (вторая может быть как гиперупругим телом, так и, при подходящей выборе уравнения состояния, газом или жидкостью, то есть не испытывать напряжений при сдвиговых деформациях). Тензор напряжений и скорость движения смеси вводятся как соответствующие средние. Таким образом, модель является односкоростной (то есть равновесной по скорости). Уравнение состояния вводятся таким способом, что построенные определяющие соотношения для напряжений смеси термодинамически согласованы с ним. В выражении для полной энергии ее «гидродинамическая» часть вычисляется как взвешенное среднее, сдвиговая часть — зависит только от тензора градиента деформации твердой фазы.

В работе [40] на основе описанной выше модели [8] построены обобщения предложенных моделей для учета упругопластических деформаций в рамках релаксационной модели. Особенностью модели является «релаксационная» формулировка стандартной

теории пластического течения, формулируемой с использованием понятия поверхности текучести.

Уравнения модели сходны с уравнениями модели из [8], однако «геометрическое» уравнение записывается относительно тензора Фингера для твердой фазы. Рассмотрена как равновесная по давлению модель, так и неравновесная. Последняя строится на основе равновесной формальной заменой условия равенства давлений фаз на кинетическое уравнение, обеспечивающее совпадение давлений за конечное но малое время релаксации. Такая процедура производится в силу того, что обеспечить выполнение условий жесткой релаксации давлений фаз в вычислительном алгоритме является сложной задачей.

Уравнения неравновесной модели включают в себя: уравнения закона сохранения массы для фаз (по числу фаз); уравнения для объемной концентрации твердой фазы; уравнения закона сохранения импульса для смеси; уравнение закона сохранения энергии для смеси; уравнение баланса внутренней энергии для фаз (по числу фаз); уравнение для тензора градиента деформации для одной из фаз (твердой).

Так же, как и модель в [8], описываемая здесь модель является двухфазной, причем одна из фаз – газовая или жидкая (то есть не требует для описания ее деформации привлечения тензора дисторсии или эквивалентных в смысле полноту описания деформации среды величин).

Обобщение предложенной в [40] модели на случай произвольного числа гиперупругих фаз с учетом пластических эффектов предложено в [41]. Рассматривается как равновесная по давлению фаз, так и неравновесная модель. Необходимость построения неравновесной модели мотивируется, как и в предыдущей работе, сложностью выполнения условий жесткой релаксации давления («проблема замыкания»).

Уравнения неравновесной модели включают в себя: уравнения баланса объемной доли фазы (по числу фаз); уравнения компонент обратного тензора градиента деформации (по числу фаз); уравнение закона сохранения массы для смеси; уравнение закона сохранения импульса для смеси; уравнения баланса внутренней энергии фаз (по числу фаз). Таким образом, модель является равновесной по скоростям. Уравнения состояния фаз записываются для каждой фазы, соответствующие выражения зависят только от «своих» переменных каждой фазы. В силу того, что жидкости и газы могут описываться уравнениями состояния, которые являются частным случаем гиперупругой модели среды, часть фаз в описанной модели может быть жидкостью или газом.

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

- Среди приведенных моделей отсутствует прямой аналог модели Баера-Нунциато с 7-ю уравнениями, то есть полностью неравновесной по скорости и термодинамическим параметрам модели. Это связано с тем, что такая модель включает в себя большое число уравнений.
- Применение моделей с меньшим числом уравнений, которые соответствуют условиям жесткой релаксации давления (аналоги модели Баера-Нунциато с 6-ю уравне-

ниями) приводит к необходимости решения (по крайней мере, с алгоритмической точки зрения), проблемы замыкания, которая не всегда может быть корректной с точки зрения термодинамики системы и не позволяет использовать «свои» уравнения состояния для фаз.

- По этой причине в качестве перспективных моделей рассматриваются неравновесные по термодинамическим параметрам модели.
- Редукция числа уравнений системы возможна за счет рассмотрения моделей, которые равновесны по скоростям.
- Описанные модели (за исключением предложенной в [8]) используют либо «усредненный» тензор градиента деформации для смеси в целом, либо тензоры градиента деформаций для каждой фазы. В первом случае возникает проблема построения уравнений состояния, так как необходима возможность «выделить» из меры деформации смеси ее «часть», соответствующую конкретной фазе.

Помимо указанных выше существуют также другие подходы. В работах [55–57] описывается разработанный авторами подход FVCF-NIP (Finite volume with Characteristic Flux-Natural Interface Position) для расчета многоматериальных гидродинамических течений. Учет динамики границ осуществляется в рамках предложенного авторами метода NIP (Natural Interface Position), который предполагает описание границы раздела фаз как разрывной кусочно-линейной линией или поверхностью. В работах [58, 60] предлагается метод решения многоматериальных задач с применением метода множеств уровня для описания динамики границ раздела фаз. Все фазы рассматриваются как твердые тела, в качестве модели твердого тела рассматриваются гиперупругие модели и их упругопластические обобщения. Значительная часть этих работ посвящена вопросам разработки методов решения гиперупругих задач, в частности, рассматриваются вопросы построения численных потоков типа HLLC для гиперупругих задач. В работах [61] описывается метод решения многоматериальных задач, в котором фазы могут быть как жидкими или газообразными, так и твердыми телами. Предлагается однородная по способу описания среды разностная схема. Подход позволяет описывать условия скольжения без трения. Для описания деформации всех фаз используется тензор дисторсии (тензор градиента деформации). Для описания динамики границы раздела фаз использует метод множеств уровня. Высокий порядок метода обеспечивается применением схем типа WENO. В работе [62] предложен подход, в котором для описания движения жидкой или газообразной среды используется многокомпонентной моделью, твердые тела описываются гиперболической моделью гиперупругости. Для описания динамики границ применяется метод множеств уровня. Для расчета численных потоков и состояния в «смешанных» ячейках используется решение смешанной (относительно состояний) задачи Римана о распаде разрыва.

## § 1.6. Методы построения термодинамически согласованных моделей

Обзор подходов, который могут быть применены для построения математических моделей многофазных сред в рамках подхода «диффузной границы» представлен в [72]. В силу специфики этой работы, в ней рассмотрены только способы построения моделей, в которых все фазы являются жидкими или газообразными. Однако наличие твердых фаз не меняет ситуации качественно.

В целом можно выделить три основных подхода:

- Метод усреднения. в этом случае сначала записываются уравнения «микроуровня», с разрешением пространственной динамики всех фаз. После этого эти уравнения усредняются и получаются уравнения для усредненных величин (скорости, плотности, объемной доли и так далее). Основная сложность при этом заключается в построении корректной усредненной математической модели межфазного взаимодействия (внутренних сил системы, действующих на границе раздела фаз). Пример такого подхода см, например, в [66, 72].
- Методы рациональной механики сплошных сред, основанные, в том числе на применении процедуры Колмана-Нолла ([76]). Такой подход был использован, в частности, в фундаментальной работе [1].
- Предложенный в работах метод DEM (Discrete Equation Method, «метод дискретных уравнений») [69] Суть метода заключается в следующем. В классическом варианте, построение способа расчета многофазного течения можно представить виде: «первичные уравнения с заданными допущениями о топологии распределения фаз» → «модель для средних величин с использованием эмпирических соотношений» → «численный метод и программная реализация». Первый переход в этой схеме, то есть построение корректной модели многофазного течения в терминах средних величин, является наиболее сложно формализуемым. Идея метода DEM заключается в его устранении следующим способом: изначально рассматриваются только первичные уравнения с заданными геометрическими допущениями об областях занятых фазами (а усредненная модель не выписывается). Далее эти первичные уравнения аппроксимируются, например, методом конечных объемов и в рамках этого («дискретного») усреднения строится способ расчета осмысленных и наблюдаемых средних, макроскопических, величин.

Сравнительный анализ эффективности DEM по сравнению с первыми двумя традиционными подходами в настоящее время сложно провести. Однако с его помощью [72] получено решения ряда важных задач, в том числе построены симметричные по своим аргументам выражения для «интерфейсных» значений скорости и давления.

## Глава 2. Многофазная модель с гиперупругим поведением фаз

Настоящая глава посвящена выводу многоскоростной многожидкостной модели динамики многофазной среды с гиперупругим поведением фаз. Предложенная модель может рассматриваться как обобщение хорошо известной модели Баера-Нунциато [1], которая первоначально была разработана для описания процесса перехода дефлаграции в детонацию и явно предполагает, что тензор напряжений фаз, определяемый уравнением состояния среды, является шаровым.

Для предложенной модели рассмотрены ее частные случаи как с полным, так и с шаровым тензором напряжений. Показано, что известные в литературе варианты модели с шаровым тензором напряжений являются частными случаями представленной гиперупругой модели.

Модель Баера-Нунциато была выведена в рамках методов рациональной механики сплошной среды, предложенной и развитой в работах К. Трусделла и его научной школы [47, 76–78]. Основные принципы построения соответствующих математических моделей многофазных сред в рамках рациональной термомеханики подробно рассмотрены в фундаментальной монографии [47]. Дальнейшее развитие данного подхода представлено и подробно описано в обзорной работе [79], которая не потеряла свою актуальность до настоящего времени. Упомянутая выше модель Баера-Нунциато является вариантом реализации общих методов построения многофазных моделей, пригодным для решения конкретного класса прикладных задач. Более сложные модели рассматриваемого типа, в том числе гиперупругие, имели скорее теоретический характер, не применялись для решения прикладных задач, практически не исследовались с вычислительной точки зрения и скорее иллюстрировали применение общих принципов построения.

Однако в последние десятилетия эйлеровы многоскоростные модели динамики многофазных сред стали рассматриваться как эффективная альтернатива лагранжевым и смешанным эйлерово-лагранжевым подходам, традиционно применяемым для математического моделирования многоматериальных сред с прямым разрешением эволюции межфазных границ. В результате за это время был предложен целый ряд многофазных моделей с гиперупругим поведением фаз. Они отличаются различной термодинамической и механической «степенью равновесности», а также использованием одного (для смеси) или нескольких (для каждой фазы) тензоров дисторсии для описания деформации фаз. Отметим следующие работы по данной теме: [74] (один тензор дитор-

сии для смеси или по числу фаз тензоров дисторсии, один закон сохранения импульса и энергии для смеси), [80] (число тензоров дисторсии по числу фаз, неравновесная по давлению, односкоростная), [75] (число тензоров дисторсии по числу фаз, равновесная по температуре и давлению), [41] (число тензоров дисторсии по числу фаз, равновесная по скоростям и давлениям).

Несмотря на существующий теоретический задел, подавляющее большинство моделей, используемых в этих работах, не выводятся: вид уравнений модели и определяющих соотношений постулируется, а их термодинамическая корректность, то есть справедливость соответствующего энтропийного неравенства, проверяется постфактум. Такой подход гарантирует термодинамическую корректность модели — однако не позволяет точно охарактеризовать соответствующие ей допущения и степень их общности (в том числе, — их избыточность). Как следствие, затруднительно указать область их применимости. Несомненно, это является проблемой при применении уравнений модели для решения содержательных задач.

Сколь-либо полный системный вывод многофазных многоскоростных моделей, являющихся гиперупругим обобщением модели Баера-Нунциато, представлен в работе [81] и основанной на ней работе [82].

В настоящей работе представлен систематический вывод гиперупругого обобщения модели Баера-Нунциато исходя из «первых принципов» 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. В цитированных выше работах такой случай не рассматривается, но указывается как формальное обобщение. В настоящей работе он является естественным результатом — более того, тензор интерфейсных напряжений не может быть формально задан шаровым.

Тем не менее построенная модель не является наиболее общей — при ее выводе существенным является допущение о том, что совместное деформирование гиперупругих фаз может быть описано с использованием единственного скалярного параметра — объемной доли фазы. Более общий случай, рассмотренный в [81], предполагает использование для этого, помимо уже упомянутой объемной доли, так называемого «тензора растяжений» (“distention tensor”). Помимо этого, в настоящей работе предполагается отсутствие обмена массой между фазами. Это условие, как показано в работе [81], является крайне существенным с точки зрения выбора параметров состояния модели.

Обобщения предложенной модели на оба этих случая являются предметом будущей работы. Здесь следует отметить, что использование «тензора растяжений» для описания совместного деформирования фаз является проблематичным на практике в



силу сложности построения соответствующего набора конкретных определяющих соотношений для него. По этой причине «практичный» вариант полученной в [81] и применяемой в [1] модели предполагает, что он является шаровым и, при отсутствии обмена массой между фазами, определяется их объемными долями.

Укажем отличия (помимо сформулированных выше) предложенной в настоящей работе модели от моделей [81] и [82]:

1. В качестве первичных переменных используются истинные плотности фаз.
2. Деформация фазы описывается «истинным» тензором дисторсии, который отнесен к объему фазы (в работе [81] используется «средний» тензор дисторсии, отнесенный к объему пространства).

3. Так называемые интерфейсные напряжения являются полными (то есть не шаровыми) тензорами. Это является следствием вывода определяющих уравнений модели, а не допущением, от которого можно отказаться. В силу этого, модели, предложенные в работах [81] и [82] не являются частными случаями рассматриваемой новой модели.

Как и другие модели рассматриваемого класса, построенная в настоящей работе модель является чисто эйлеровой и полностью неравновесной. С точки зрения непосредственно вывода, как уже отмечалось, настоящая работа является, на взгляд авторов, наиболее полной.

Отметим, что в рамках феноменологической термомеханики существуют другие подходы, пригодные для построения моделей рассматриваемого класса и отличные от традиционных подходов школы рациональной термомеханики К. Трусделла. Прежде всего, формализм на основе термодинамически согласованных систем законов сохранения систем уравнений, развиваемый в работах [46, 83–86]. Многофазные гиперупругие модели, разработанные в рамках указанного подхода изложены, в частности, в работе [73]. Отметим также важную монографию [87], которая предлагает альтернативный общий и системный подход к конструированию многофазных многоскоростных моделей механики сплошной среды.

## § 2.1. Основные обозначения

Будем обозначать векторы строчными буквами жирным шрифтом:  $\mathbf{u}$ ; тензоры второго ранга — прописными буквами жирным прямым шрифтом:  $\mathbf{F}$ ; скалярные величины — шрифтом с нормальным начертанием:  $F_{ij}$ ,  $A$ ,  $u_k$ ,  $\varphi$ . Здесь и далее, если не сказано противное, по повторяющимся индексам предполагается суммирование.

Будем рассматривать движение среды в некоторой области евклидова пространства  $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$ . Каждой точке  $M \in \mathcal{B}$  поставим во взаимно-однозначное соответствие ее радиус-вектор  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  с декартовыми координатами в прямоугольной декартовой системе координат  $\mathcal{O}x_1x_2x_3$  с базисными векторами  $\mathbf{e}_i$ ,  $i = \overline{1, 3}$ . Координаты  $x_i$  будем называть эйлеровыми или пространственными координатами точки  $M$ . Помимо этого, введем координаты  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  той же самой материальной точки  $M$  в прямоугольной декартовой системе координат  $\mathcal{O}\xi_1\xi_2\xi_3$  с базисными векторами  $\mathbf{r}_i$ , которые

полагаем не меняющимися при любых движениях сплошной среды. Координаты  $\xi_i$  будем называть лагранжевыми или материальными координатами точки среды.

Движение точки  $M$  сплошной среды в декартовой системе координат  $\mathbf{e}_i$  определяется параметризованным временем  $t$  отображением  $\phi$ :

$$\mathbf{x} = \phi(\boldsymbol{\xi}, t) = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t), \quad (2.1)$$

или обратным к нему

$$\boldsymbol{\xi} = \phi^{-1}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t). \quad (2.2)$$

В базисе  $\mathbf{e}_i$  какой-либо вектор  $\mathbf{a}$  может быть представлен как  $\mathbf{a} = a_i \mathbf{e}_i$ , а тензор  $\mathbf{A}$  — как  $\mathbf{A} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ , где  $\otimes$  — диадное (тензорное) произведение векторов. Операцию транспонирования определим как  $\mathbf{A}^T = A_{ji} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ .

Равенство по определению (присваивание) обозначается символом «:=». В дальнейшем мы будем считать, что по определению

$$\begin{aligned} \nabla \varphi &:= \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \mathbf{e}_k & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &:= a_i b_i, \\ \nabla \cdot \mathbf{a} &:= \frac{\partial a_k}{\partial x_k} = \operatorname{div} \mathbf{a}, & \nabla \otimes \mathbf{a} &:= \frac{\partial a_j}{\partial x_k} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_j, \\ \operatorname{div} \mathbf{A} \equiv \nabla \cdot \mathbf{A} &:= \frac{\partial A_{ij}}{\partial x_j} \mathbf{e}_i, & \nabla \otimes \mathbf{A} &:= \frac{\partial A_{ij}}{\partial x_k} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \det \mathbf{A} &:= \frac{1}{6} \epsilon_{ijk} \epsilon_{mnl} A_{im} A_{jn} A_{kl}, & \mathbf{A} \cdot \mathbf{u} &:= A_{jk} u_k \mathbf{e}_j, \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{A} &:= A_{kj} u_k \mathbf{e}_j, & \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} &:= A_{ik} B_{kj} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \mathbf{A} : \mathbf{B} &:= A_{ij} B_{ij}, & |\mathbf{a}|^2 &:= \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = a_i a_i, \\ \operatorname{tr} \mathbf{A} &:= \mathbf{A} : \mathbf{I} \equiv A_{ii}, & |\mathbf{A}|^2 &:= \mathbf{A} : \mathbf{A} = A_{ij} A_{ij}, \\ \mathbf{I} &:= \delta_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \end{aligned}$$

где по повторяющимся индексам проводится суммирование. Здесь  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера,  $\epsilon_{ijk}$  — символ Леви-Чивиты. В частности, из этих определений следуют следующие формулы

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = \mathbf{B} : \mathbf{A}, \quad (2.3)$$

$$\mathbf{C} : (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} : (\mathbf{C} \cdot \mathbf{B}^T) = \mathbf{B} : (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{C}), \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \det \mathbf{A}}{\partial \mathbf{A}} = (\det \mathbf{A}) \mathbf{A}^{-T}. \quad (2.5)$$

Для дальнейшего изложения будут полезны следующие соотношения:

$$\begin{aligned}\nabla \otimes (\mathbf{A} \cdot \mathbf{u}) &= (\nabla \otimes \mathbf{A}) \cdot \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A}^T, \\ \nabla \otimes (\mathbf{u} \cdot \mathbf{A}) &= (\nabla \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{A} + (\nabla \otimes \mathbf{A}^T) \cdot \mathbf{u}, \\ \nabla (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) &= (\nabla \otimes \mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} + (\nabla \otimes \mathbf{b}) \cdot \mathbf{a}, \\ \nabla \cdot (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) &= (\nabla \cdot \mathbf{b}) \otimes \mathbf{a} + \mathbf{b} \cdot \nabla \otimes \mathbf{a}.\end{aligned}$$

Также для базисных векторов верны соотношения:

$$(\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \cdot \mathbf{e}_k = \delta_{jk} \mathbf{e}_i, \quad \mathbf{e}_k \cdot (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) = \delta_{ki} \mathbf{e}_j. \quad (2.6)$$

Главные инварианты произвольного тензора  $\mathbf{A}$  второго ранга обозначаются как  $I_1(\mathbf{A})$ ,  $I_2(\mathbf{A})$  и  $I_3(\mathbf{A})$ :

$$I_1(\mathbf{A}) := \text{tr } \mathbf{A}, \quad I_2(\mathbf{A}) := \frac{1}{2} [I_1^2(\mathbf{A}) - I_1(\mathbf{A}^2)], \quad I_3(\mathbf{A}) := \det \mathbf{A}. \quad (2.7)$$

Полная (субстанциональная, лагранжева, материальная) производная по времени  $t$  величины  $(\cdot)$ , которая может быть тензором любого ранга, обозначается  $\frac{d(\cdot)}{dt}$  и определена как

$$\frac{d(\cdot)}{dt} = \partial_t (\cdot) + \mathbf{u} \cdot \nabla \otimes (\cdot). \quad (2.8)$$

Частная производная по времени  $t$  обозначается как  $\partial_t (\cdot)$ . Определим двухточечный тензор градиента деформации как [46, 88]

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\xi}, t) := \mathbf{r}_i \otimes \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_i} = \frac{\partial x_j}{\partial \xi_i} \mathbf{r}_i \otimes \mathbf{e}_j = F_{ij} \mathbf{r}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (2.9)$$

и обратный к нему тензор дисторсии как

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) := \nabla \otimes \boldsymbol{\xi} = \mathbf{e}_i \otimes \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial x_i} = \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{r}_j = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{r}_j. \quad (2.10)$$

Помимо этого, можно показать [46], что для тензора дисторсии (2.10) выполнено условие совместности:

$$\frac{\partial A_{ij}}{\partial x_k} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{r}_j = \frac{\partial A_{kj}}{\partial x_i} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{r}_j.$$

Из него, в частности, следует формула

$$(\nabla \otimes \mathbf{A}^T) \cdot \mathbf{u} = \mathbf{u} \cdot (\nabla \otimes \mathbf{A}). \quad (2.11)$$

## § 2.2. Вывод многофазной модели

В настоящем разделе представлен вывод модели типа Баера-Нунциато для описания динамики двухфазной смеси несмешивающихся фаз («immiscible mixture»). Тер-

мин «несмешивающиеся фазы» означает, что в набор параметров состояния фаз модели входят объемные доли фаз.

Рассматривается простейший вариант модели, в котором условия совместной деформации фаз определяются единственным параметром — объемной долей фазы. Построенная модель является неравновесной. Каждая фаза описывается собственным набором переменных, в число которых входит скорость и набор термодинамических параметров состояния. Взаимодействие фаз определяется обменными слагаемыми, входящими в уравнения законов сохранения консервативных величин.

Последовательность изложения имеет следующий вид. Сначала вводятся основные понятия, связанные с описанием движения среды (как параметризованного временем отображения отсчетной конфигурации в актуальную). Основное внимание уделяется определению тензоров дисторсии фаз и формулировке закона сохранения массы. Последний существенно отличается от остальных (законов сохранения импульса и энергии), так как, по существу, связан с движением среды как геометрическим отображением и не связан с конкретными физическими процессами, определяющими это движение.

Далее рассматривается полная система уравнений модели, которая постулируется с точностью до вида определяющих соотношений. Она включает в себя законы сохранения массы, импульса и энергии. Они дополняются уравнением состояния и энтропийным неравенством, выражающим второй закон термодинамики.

После этого применяется процедура Колмана-Нолла, суть которой — использование энтропийного неравенства как ограничения на возможный вид определяющих соотношений модели.

Модель, описывающая эволюцию многоскоростного многофазного континуума, определяемая составом и формой входящих в нее уравнений, может иметь различный вид и быть построена различными способами. В дальнейшем при построении модели будем руководствоваться так называемыми «аксиомами Трусделла» [89], суть которых — указать структуру многофазной модели с учетом того, как устроены более простые, однофазные модели. В качестве однофазного «предельного» случая многофазной гиперупругой модели здесь выступает гиперупругая модель Годунова-Роменского. При выводе модели динамики многофазных сред используются (среди прочих; полный список аксиом метафизики Трусделла нам далее не понадобится, неуказанные аксиомы выполняются тождественно и не влияют на вывод модели) два предположения:

1. Поведение каждой фазы совпадает с поведением однофазной среды за исключением случаев межфазного взаимодействия (обмен импульсом и энергией на межфазных границах);
2. Законы сохранения для смеси должны иметь такой же вид, как и для однофазной среды и следовать из суммирования законов сохранения для каждой из фаз.

В целом будем следовать обоснованной методике, предложенной в рамках рациональной механики сплошных сред [89] и использованной, в частности, в оригинальной работе [1].

### 2.2.1. Основные определения

#### и «геометрические» уравнения

Будем считать, что двухфазная среда описывается двумя взаимопроникающими континуумами, присутствующими в каждой точке  $\mathbf{x}$  пространства  $\mathbb{R}^3$  в каждый момент времени  $t \geq 0$ . Состояние континуумов описывается одинаковым набором параметров состояния. Перемещение материальных точек континуумов  $p = 1, 2$  задается определенным во всем пространстве отображением  $\mathbf{x}^p = \phi^p(\boldsymbol{\xi}^p, t)$ , где  $\boldsymbol{\xi}^p$  — лагранжевы координаты материальных точек континуума  $p$ ,  $\mathbf{x}^p$  — эйлерова координата лагранжевой точки  $\boldsymbol{\xi}^p$ . Соответствующие поля скоростей определяются как  $\mathbf{u}^p = \mathbf{u}^p(t, \mathbf{x}) = \partial_t \phi^p$ . Континуумы будем считать соответствующими одной определенной фазе и в дальнейшем будем отождествлять эти термины.

#### Движение, дисторсия и плотность

Пусть элемент сплошной среды объемом  $V$  состоит из двух несмешивающихся фаз с номерами  $p = 1, 2$ . Обозначим объем, занимаемый каждой фазой, как  $V^p$ . Будем считать, что присутствующие в объеме  $V$  фазы заполняют его целиком, то есть

$$V^{(1)} + V^{(2)} = V. \quad (2.12)$$

Введём объемную долю  $\alpha^p(\mathbf{x}, t)$  фазы с номером  $p$  как  $\alpha^p = V^p/V$ . Тогда условие (2.12) можно переписать в виде

$$\sum_{p=1,2} \alpha^p = 1. \quad (2.13)$$

*Замечание 2.2.1.* Условия (2.12) и (2.13) являются внешними ограничениями, которые накладываются на движение среды. В ситуациях, отличных от рассматриваемой в настоящей работе, они могут не выполняться (например, это справедливо для сыпучих сред).

Введем среднюю плотность среды  $\rho$  как:

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{\gamma^{(1)}V^{(1)} + \gamma^{(2)}V^{(2)}}{V} = \alpha^{(1)}\gamma^{(1)} + \alpha^{(2)}\gamma^{(2)} = \rho^{(1)} + \rho^{(2)}, \quad (2.14)$$

а также средний импульс среды  $\rho \mathbf{u}$ ,

$$\rho \mathbf{u} = \alpha^{(1)}\gamma^{(1)}\mathbf{u}^{(1)} + \alpha^{(2)}\gamma^{(2)}\mathbf{u}^{(2)} = \rho^{(1)}\mathbf{u}^{(1)} + \rho^{(2)}\mathbf{u}^{(2)}, \quad (2.15)$$

и среднюю полную энергию среды  $E$ ,

$$\rho E = \alpha^{(1)}\gamma^{(1)}E^{(1)} + \alpha^{(2)}\gamma^{(2)}E^{(2)} = \rho^{(1)}E^{(1)} + \rho^{(2)}E^{(2)}. \quad (2.16)$$

Истинная плотность  $\gamma^p(\mathbf{x}, t)$  фазы с номером  $p$  равна

$$\gamma^p = \frac{m^p}{V^p}, \quad (2.17)$$

а средняя плотность  $\rho^p$  фазы с номером  $p$  —

$$\rho^p = \alpha^p \gamma^p. \quad (2.18)$$

Отметим, что средняя плотность смеси

$$\rho = \sum_{p=1,2} \rho^p. \quad (2.19)$$

Далее будем считать, что фазы не обмениваются массой (в частности, в среде отсутствуют химические реакции).

*Замечание 2.2.2.* Это условие существенно. При добавлении обменных массовых слагаемых изменится множество параметров состояния системы — как показано в работе [81], для ее описания будет недостаточно использовать истинные или средние плотности, объемные доли фаз и их дисторсию.

Отметим, что именно такой подход изначально применяется в оригинальной модели Баера-Нунциато, описанной в работе [1]. Как показано в работе [81], построенная модель не вполне корректна, если происходит обмен массой между фазами — хотя именно для такого типа задач (переход дефлаграции в детонацию), модель Баера-Нунциато и создавалась.

*Постулируем*, что истинные плотности фаз могут быть определены как

$$\gamma^p = \gamma_0^p \det \mathbf{A}^p, \quad (2.20)$$

где  $\gamma_0^p$  — истинная плотность фазы  $p$  в отсчетной конфигурации,  $\mathbf{A}^p$  — «истинный» тензор дисторсии (термин «истинный» здесь обозначает, что уравнение (2.20) определяет истинную, а не среднюю плотность фазы). Уравнение для эволюции последнего по определению постулируются в виде:

$$\dot{\mathbf{A}}^p = -(\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{A}^p + \mathbf{l}^p, \quad (2.21)$$

где  $\mathbf{l}^p$  — обменное слагаемое, связанное с выполнением условий совместного деформирования фаз. Субстанциональная (материальная, лагранжева) производная для каждой из фаз определена аналогично (2.8)

$$(\dot{\cdot})^p = \frac{\partial}{\partial t} (\cdot)^p + \mathbf{u}^p \cdot \nabla \otimes (\cdot)^p. \quad (2.22)$$

Отметим, что левая часть уравнения (2.21) в точности совпадает с аналогичным уравнением для однофазной гиперупругой модели Годунова-Роменского. В отличие от од-

нофазного случая, здесь это уравнение не является следствием уравнения движения среды, а постулируется как первичное соотношение.

Далее будем считать объемные доли  $\alpha_p$  первичными параметрами состояния среды, а уравнение (2.18) — определением средней плотности фазы. Очевидно, что ввиду определения (2.20) и соотношения (2.18) тензор  $\mathbf{l}^p$  не может быть выбран произвольно.

Определим, каким условиям должен удовлетворять тензор  $\mathbf{l}^p$ . Можно показать (см. [21]), что следствием уравнений (2.21) и (2.20) и сделанных допущений является следующее уравнение, описывающее баланс истинных плотностей фаз:

$$\dot{\gamma}^p = -\gamma^p \nabla \cdot \mathbf{u}^p + \gamma^p (\mathbf{A}^p)^{-T} : \mathbf{l}^p. \quad (2.23)$$

Получим теперь уравнение для эволюции средней плотности фазы, определенной соотношением (2.18). Из (2.18) и (2.23) следует, что

$$\partial_t \rho^p + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p) = \rho^p (\mathbf{A}^p)^{-T} : \mathbf{l}^p + \gamma^p \dot{\alpha}^p. \quad (2.24)$$

В силу того, что средняя плотность  $\rho^p$  фазы является консервативной величиной (в отличие от ее истинной плотности  $\gamma^p$ ), получаем:

$$(\mathbf{A}^p)^{-T} : \mathbf{l}^p = -\frac{\dot{\alpha}^p}{\alpha^p}. \quad (2.25)$$

Отметим, что в силу того, что  $\mathbf{A}^p$  — невырожденный тензор и  $\dot{\alpha}^p \neq 0$ , то  $\mathbf{l}^p \neq 0$ . В результате следствием введенных выше определений и условия (2.25) является закон сохранения массы фазы с индексом  $p$  в виде

$$\dot{\rho}^p = -\rho^p \nabla \cdot \mathbf{u}^p. \quad (2.26)$$

Таким образом, приведенный вид обменного слагаемого в уравнении на компоненты тензора дисторсии обеспечивает корректный вид уравнения неразрывности в многофазном случае.

*Замечание 2.2.3.* При выборе обменного слагаемого согласно условию, сформулированному в уравнении (2.25), уравнения (2.21), (2.26) и (2.20) являются связанными, как и в однофазном случае. Таким образом, обеспечивается корректное «определение» тензора дисторсии через условие (2.20), а также соответствие уравнений эволюции компонент тензора дисторсии (2.21) и закона сохранения масс (2.26), которые в предельном однофазном случае переходят в свои однофазные аналоги.

## Мера деформации

Для инвариантности определяющих соотношений относительно рассматриваемой системы отсчета выберем в качестве меры деформации симметричный метрический

тензор деформации (тензор Фингера):

$$\mathbf{G}^p = \mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{A}^p)^T. \quad (2.27)$$

Получим эволюционное уравнение для компонентов метрического тензора деформации. Для полной производной метрического тензора имеем

$$\dot{\mathbf{G}}^p = \mathbf{A}^p \cdot (\dot{\mathbf{A}}^p)^T + \dot{\mathbf{A}}^p \cdot (\mathbf{A}^p)^T. \quad (2.28)$$

Из уравнения (2.28) с учетом (2.21) можно прийти к (см. [21]):

$$\dot{\mathbf{G}}^p = -\mathbf{G} \cdot (\nabla \otimes \mathbf{u}^p)^T - (\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{G} + \Phi^p, \quad (2.29)$$

где

$$\Phi^p = \mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{l}^p)^T + \mathbf{l}^p \cdot (\mathbf{A}^p)^T. \quad (2.30)$$

Получим условие, эквивалентное (2.25) для обменного слагаемого  $\Phi$ . Для этого примем, что истинная плотность фазы  $p$  определяется компонентами метрического тензора деформации:  $\gamma^p = \gamma^p(\mathbf{G}^p)$ . Помимо этого, из определения  $\mathbf{G}^p$  согласно уравнению (2.27) следует, что

$$\det \mathbf{G}^p = \det (\mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{A}^p)^T) = \det \mathbf{A}^p \det (\mathbf{A}^p)^T = (\det \mathbf{A}^p)^2.$$

Тогда уравнение (2.20) примет вид:

$$\gamma^p = \gamma_0^p \sqrt{\det \mathbf{G}^p}.$$

Отсюда получим для материальной производной истинной плотности:

$$\dot{\gamma}^p(\mathbf{G}^p) = \frac{\partial \gamma^p}{\partial \mathbf{G}^p} : \dot{\mathbf{G}}^p. \quad (2.31)$$

Для первого множителя получим:

$$\frac{\partial \gamma^p}{\partial \mathbf{G}^p} = \frac{\partial \gamma_0^p \sqrt{\det \mathbf{G}^p}}{\partial \mathbf{G}^p} = \frac{\gamma_0}{2\sqrt{\det \mathbf{G}^p}} \frac{\partial \det \mathbf{G}^p}{\partial \mathbf{G}^p} = \frac{\gamma_0}{2\sqrt{\det \mathbf{G}^p}} \det \mathbf{G}^p (\mathbf{G}^p)^{-T} = \frac{1}{2} \gamma^p (\mathbf{G}^p)^{-T}.$$

Подставляя уравнение (2.29) для эволюции метрического тензора деформации в уравнение (2.31), придем к:

$$\dot{\gamma}^p(\mathbf{G}^p) = -\gamma^p (\nabla \cdot \mathbf{u}^p) + \frac{1}{2} \gamma^p (\mathbf{G}^p)^{-T} : \Phi^p.$$

Тогда для средней плотности можно получить уравнение:

$$\dot{\rho}^p = -\rho^p \nabla \cdot \mathbf{u}^p + \frac{1}{2} \rho^p (\mathbf{G}^p)^{-T} : \Phi^p + \gamma^p \dot{\alpha}^p,$$



или

$$\partial_t \rho^p + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p) = \frac{1}{2} \rho^p (\mathbf{G}^p)^{-T} : \Phi^p + \gamma^p \dot{\alpha}^p.$$

Следовательно, эквивалентным условием (2.25) для обменного слагаемого  $\Phi^p$  в (2.29) будет условие:

$$\frac{1}{2} (\mathbf{G}^p)^{-T} : \Phi^p = -\frac{\dot{\alpha}^p}{\alpha^p}.$$

### 2.2.2. Основные уравнения

В соответствии со сформулированными во введении к разделу 2.2 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. Соответствующая система законов сохранения модели имеет вид:

$$\partial_t \rho^p + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p) = 0, \quad (2.32a)$$

$$\partial_t (\rho^p \mathbf{u}^p) + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p) = -\mathbf{T}^I \cdot \nabla \alpha^p + \mathcal{S}_u^p, \quad (2.32b)$$

$$\partial_t (\rho^p E^p) + \nabla \cdot (\rho^p E^p \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p \cdot \mathbf{u}) = -\mathbf{T}^I : (\mathbf{u}^I \otimes \nabla \alpha^p) + \mathcal{S}_E^p, \quad (2.32c)$$

где  $\rho^p = \alpha^p \gamma^p$  — средняя плотность фазы,  $\mathbf{T}^I$  — интерфейсное напряжение,  $\mathbf{u}^I$  — интерфейсная скорость,  $\mathcal{S}_u^p$  — обменное слагаемое в законе сохранения импульса,  $\mathcal{S}_E^p$  — обменное слагаемое в законе сохранения энергии; согласно сформулированным выше принципам построения многофазной модели, обменные слагаемые должны удовлетворять условиям:

$$\mathcal{S}_u^{(1)} + \mathcal{S}_u^{(2)} = \mathbf{0}, \quad \mathcal{S}_E^{(1)} + \mathcal{S}_E^{(2)} = 0. \quad (2.33)$$

Полная энергия для каждой из фаз определена как

$$E^p = \mathcal{U}^p + \frac{1}{2} \mathbf{u}^p \cdot \mathbf{u}^p.$$

В дальнейшем будет использована лагранжева форма описанных выше уравнений. Соответствующая система уравнений имеет вид:

$$\dot{\rho}^p = -\rho^p \nabla \cdot \mathbf{u}^p, \quad (2.34a)$$

$$\rho^p \dot{\mathbf{u}}^p = \nabla \cdot \mathbf{T}^p - \mathbf{T}^I \cdot \nabla \alpha^p + \mathcal{S}_u^p, \quad (2.34b)$$

$$\rho^p \dot{\mathcal{U}}^p = \mathbf{T}^p : (\nabla \otimes \mathbf{u}^p) - \mathbf{T}^I : ((\mathbf{u}^I - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p) + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p. \quad (2.34c)$$

*Замечание 2.2.4.* Постулируемый вид уравнений (2.32) или (2.34) формально может быть обоснован различными способами, как в рамках феноменологических подходов (см., например, [47] или [81]), так и в рамках подходов, основанных на усреднении микромеханических моделей [2].

Любая из систем (2.32) и (2.34) должна быть дополнена следующими определяющими соотношениями:

- определяющим уравнением (2.21) для тензора дисторсии фазы  $p = 1, 2$ , которое повторим здесь в виде

$$\dot{\mathbf{A}}^p = -(\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{A}^p + \mathbf{l}^p,$$

где обменное слагаемое  $\mathbf{l}^p$  удовлетворяет сформулированному в предыдущем разделе соотношению (2.25).

- определяющим соотношением для объемной доли  $\alpha_p$  фазы  $p = 1, 2$ :

$$\dot{\alpha}^p = f(\dots),$$

где  $f(\dots)$  — заданная функция параметров состояния системы.

- уравнением состояния для каждой из фаз  $p = 1, 2$ , которое имеет вид заданной зависимости внутренней энергии фазы от своих естественных переменных, где мера деформации должна быть выражена каким-либо симметричным тензором (в настоящей работе используется введенный ранее метрический тензор деформации для каждой из фаз  $\mathbf{G}^p$ ):

$$\mathcal{U}^p = \mathcal{U}^p(\alpha^p, \mathbf{G}^p, \eta^p),$$

где  $\eta^p$  — энтропия фазы с номером  $p$ .

### 2.2.3. Уравнения для объемной доли и вид обменного слагаемого для дисторсии

#### Уравнение для объемной доли

Определяющие соотношения для объемных долей *постулируем* в виде:

$$\partial_t \alpha^p + \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p = \mathcal{S}_\alpha^p, \quad p = 1, 2, \quad (2.35)$$

где  $\mathbf{u}^I$  — так называемая интерфейсная скорость, выражение для которой будет определено ниже. Из условия (2.13) следует, что

$$\mathcal{S}_\alpha^{(2)} = \partial_t \alpha^{(2)} + \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^{(2)} = -\partial_t \alpha^{(1)} - \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^{(1)} = -\mathcal{S}_\alpha^{(1)}. \quad (2.36)$$

Таким образом, условия (2.33) для обменных слагаемых должны быть дополнены еще одним:

$$\mathcal{S}_\alpha^{(1)} + \mathcal{S}_\alpha^{(2)} = 0. \quad (2.37)$$

С учетом уравнения (2.36) получим:

$$\dot{\alpha}^p = \partial_t \alpha^p + \mathbf{u}^p \cdot \nabla \alpha^p = \mathcal{S}_\alpha^p + (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \cdot \nabla \alpha^p,$$

откуда

$$\dot{\alpha}^p = \mathcal{S}_\alpha^p + (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1) \cdot \nabla \alpha^p = \mathcal{S}_\alpha^p + ((\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1) \otimes \nabla \alpha^p) : \mathbf{I}, \quad p = 1, 2. \quad (2.38)$$

### Вид обменного слагаемого для дисторсии

Обменное слагаемое для дисторсии имеет вид (2.25)

$$(\mathbf{A}^p)^{-T} : \mathbf{l}^p = -\frac{\dot{\alpha}^p}{\alpha^p}. \quad (2.39)$$

Как видно из этого уравнения, которое представляет собой одно уравнение относительно девяти компонентов тензора  $\mathbf{l}^p$ , вид последнего может быть достаточно общим. Попробуем уточнить его. Для этого сначала выполним замену переменных, положив

$$\mathbf{l}^p = \mathbf{Q}^p \cdot \mathbf{A}^p. \quad (2.40)$$

Такое  $\mathbf{Q}^p$  всегда существует в силу того, что тензор  $\mathbf{A}^p$  — невырожденный. Подставляя последнее соотношение в (2.39), получим:

$$\text{tr } \mathbf{Q}^p \equiv \mathbf{Q}^p : \mathbf{I} = -\frac{\dot{\alpha}^p}{\alpha^p}.$$

С учетом (2.38) получим:

$$\mathbf{Q}^p : \mathbf{I} = -\frac{1}{\alpha_p} [\mathcal{S}_\alpha^p + (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1) \cdot \nabla \alpha^p]. \quad (2.41)$$

Введем обозначения

$$\mathbf{a}^p = \mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1, \quad \mathbf{b}^p = \nabla \alpha^p. \quad (2.42)$$

Сделаем следующие допущения:

1.  $\mathbf{Q}^p$  — тензорная функция векторов  $\mathbf{a}^p$  и  $\mathbf{b}^p$  и скалярных инвариантов параметров состояния среды;
2. Среда является изотропной, другими словами, группа симметрий среды — полная изотропная группа  $O(3)$ , состоящая из ортогональных матриц  $\mathbf{Q}$  с определителем  $\det \mathbf{Q} = \pm 1$ .

В этом случае для  $\mathbf{Q}^p$  в соответствии с [90] справедливо представление (индекс  $p$  здесь и далее для краткости опустим):

$$\mathbf{Q} = q_0(\xi; \xi^*) \mathbf{I} + q_1(\xi; \xi^*) \langle \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \rangle_s + q_2(\xi; \xi^*) [\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}]_a, \quad (2.43)$$

где  $q_{0,1,2}$  — функции от  $\xi = \{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}, \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}\}$ , являющихся инвариантами системы векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ , и  $\xi^*$ , являющихся скалярными инвариантами других (отличных от  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ )

параметров состояния среды,

$$\langle \mathbf{X} \rangle_s = \frac{1}{2}(\mathbf{X} + \mathbf{X}^T), \quad [\mathbf{X}]_a = \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^T),$$

— симметричная и кососимметричная часть тензора  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{X} = [\mathbf{X}]_s + \langle \mathbf{X} \rangle_a$ .

Из свойств симметричной и кососимметричной матриц следует, что

$$\mathbf{I} : \mathbf{I} = 3, \quad \langle \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \rangle_s : \mathbf{I} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, \quad [\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}]_a : \mathbf{I} = 0.$$

Отсюда с учетом (2.43) следует, что:

$$\mathbf{Q} : \mathbf{I} = 3q_0 + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) q_1.$$

С другой стороны, из (2.41) имеем:

$$\mathbf{Q} : \mathbf{I} = -\frac{1}{\alpha_p} (\mathcal{S}_\alpha^{(p)} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}).$$

Таким образом, функции  $q_0$  и  $q_1$  должны удовлетворять тождеству

$$3q_0 + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) q_1 = -\frac{1}{\alpha_p} (\mathcal{S}_\alpha^{(p)} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}).$$

Величина  $\mathbf{Q} : \mathbf{I}$  зависит от  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  двояко: во-первых, как от аргумента функций  $q_{0,1,2}$  — скалярного инварианта системы системы двух векторов,  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ ; во-вторых, как от непосредственно  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ . Поэтому положим в (2.43)

$$q_0 = -\frac{1}{3\alpha_p} [\mathcal{S}_\alpha^{(p)} + \omega(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})], \quad q_1 = -\frac{1}{\alpha_p}(1 - \omega), \quad (2.44)$$

считая, что  $\omega \in [0, 1]$  — параметр. Обозначим  $\bar{\omega} = 1 - \omega$ . Далее для простоты будем полагать, что

$$q_2 = q_1.$$

В этом случае представление (2.43) принимает вид:

$$\mathbf{Q} = q_0 \mathbf{I} + q_1 \mathbf{a} \otimes \mathbf{b},$$

где параметры  $q_{0,1}$  определены согласно (2.44). В развернутом виде последнее выражение имеет вид:

$$\mathbf{Q} = q_0 \mathbf{I} + q_1 \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = -\frac{1}{\alpha_p} \left[ \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha \mathbf{I} + \frac{1}{3} \omega (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{I} + \bar{\omega} \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \right].$$

Отсюда с учетом (2.40) получим:

$$\mathbf{l}^p = \mathbf{Q}^p \cdot \mathbf{A}^p = -\frac{1}{\alpha_p} \left[ \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + \frac{1}{3} \omega (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{I} + \bar{\omega} \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \right] \cdot \mathbf{A}^p.$$

Полагая  $\mathcal{S}_\alpha^p = \omega \mathcal{S}_\alpha^p + \bar{\omega} \mathcal{S}_\alpha^p$ , запишем последнее выражение в виде:

$$\mathbf{l}^p = \omega \mathbf{l}^{1,p} + \bar{\omega} \mathbf{l}^{2,p}, \quad (2.45)$$

где

$$\mathbf{l}^{1,p} = -\frac{1}{3\alpha^p} [\mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + (\mathbf{a}^p \cdot \mathbf{b}^p) \mathbf{I}] \cdot \mathbf{A}^p = -\frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p, \quad (2.46a)$$

$$\mathbf{l}^{2,p} = -\frac{1}{\alpha^p} \left[ \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + \mathbf{a}^p \otimes \mathbf{b}^p \right] \cdot \mathbf{A}^p. \quad (2.46b)$$

Таким образом, с учетом (2.42)

$$\mathbf{l}^p = -\omega \frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p - \bar{\omega} \frac{1}{\alpha^p} \left[ \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p \right] \cdot \mathbf{A}^p. \quad (2.47)$$

### Вид обменного слагаемого для метрического тензора деформации

С учетом (2.45), (2.46a), (2.46b) выражение (2.30) для обменных слагаемых  $\Phi^p$  можно записать в виде:

$$\Phi^p = \mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{l}^p)^T + \mathbf{l}^p \cdot (\mathbf{A}^p)^T = \omega \Phi^{1,p} + \bar{\omega} \Phi^{2,p},$$

где

$$\Phi^{1,p} = \mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{l}^{1,p})^T + \mathbf{l}^{1,p} \cdot (\mathbf{A}^p)^T, \quad \Phi^{2,p} = \mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{l}^{2,p})^T + \mathbf{l}^{2,p} \cdot (\mathbf{A}^p)^T.$$

**Слагаемое  $\Phi^{1,p}$**  Из (2.46a) имеем:

$$\Phi^{1,p} = -\frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{A}^p)^T - \frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p \cdot (\mathbf{A}^p)^T = -\frac{2\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{G}^p. \quad (2.48)$$

**Слагаемое  $\Phi^{2,p}$**  Для (2.46b) имеем:

$$\mathbf{l}^{2,p} = -\frac{1}{\alpha^p} \left[ \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p \right] \cdot \mathbf{A}^p,$$

откуда (см. [21])

$$\Phi^{2,p} = -\frac{2}{3\alpha^p} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{G}^p - \left( \frac{1}{\alpha^p} [(\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p] \cdot \mathbf{G}^p \right)^T - \frac{1}{\alpha^p} [(\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p] \cdot \mathbf{G}^p. \quad (2.49)$$

## Слагаемое в процедуре Колмана-Нолла

В дальнейшем, при анализе энтропийного неравенства в процедуре Колмана-Нолла, нам понадобится значение выражения

$$\mathcal{A}^p := \frac{1}{2} ((\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{T}^p) : \Phi^p. \quad (2.50)$$

Для того чтобы не прерывать последовательность вывода вспомогательными вычислениями, проведем их тут с учетом полученных выше выражений (2.48),(2.49) для  $\Phi^{\alpha,p}$ ,  $\alpha = 1, 2$ .

В силу того, что (2.50) линейно по  $\Phi$ , представим его в виде

$$\mathcal{A}^p = \omega \mathcal{A}^{1,p} + \bar{\omega} \mathcal{A}^{2,p}.$$

Вычислим слагаемые по отдельности.

**Вычисление  $\mathcal{A}^{1,p}$**  По определению имеем:

$$\mathcal{A}^{1,p} = \frac{1}{2} ((\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{T}^p) : \Phi^{1,p} = \frac{1}{2} ((\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{T}^p) : \left( -\frac{2\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{G}^p \right) = -\frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{T}^p : \mathbf{I}. \quad (2.51)$$

**Вычисление  $\mathcal{A}^{2,p}$**  Из (2.50) и (2.49) имеем (см. [21]):

$$\mathcal{A}^{2,p} = \frac{1}{2} ((\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{T}^p) : \Phi^{2,p} = -\frac{1}{3\alpha^p} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{T}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{2\alpha^p} [(\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1) \otimes \nabla \alpha^p] : (\mathbf{T}^p + (\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{T}^p \cdot \mathbf{G}^p).$$

Далее будет показано, что для тензора напряжений верна формула Мурнагана вида:

$$\mathbf{T}^p = -2\rho^p \mathbf{G}^p \cdot \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p}.$$

Тогда

$$(\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{T}^p \cdot \mathbf{G}^p = -2\rho^p (\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{G}^p \cdot \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} \cdot \mathbf{G}^p = -2\rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} \cdot \mathbf{G}^p = (\mathbf{T}^p)^T = \mathbf{T}^p,$$

откуда

$$\mathcal{A}^{2,p} = -\frac{1}{3\alpha^p} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{T}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{\alpha^p} \mathbf{T}^p : [(\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1) \otimes \nabla \alpha^p]. \quad (2.52)$$

**Вычисление  $\mathcal{A}^p$**  Для  $\mathcal{A}^p = \omega \mathcal{A}^{1,p} + \bar{\omega} \mathcal{A}^{2,p}$  из (2.51) и (2.52) имеем

$$\mathcal{A}^p = \omega \left( -\frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{T}^p : \mathbf{I} \right) + \bar{\omega} \left( -\frac{1}{3\alpha^p} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{T}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{\alpha^p} \mathbf{T}^p : [(\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1) \otimes \nabla \alpha^p] \right).$$

С учетом выражения (2.38) для материальной производной  $\dot{\alpha}^p$  получим:

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

Отсюда с учетом

$$(\mathbf{T}^p : \mathbf{I}) (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \cdot \nabla \alpha^p = ((\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p) : (\mathbf{T}^p : \mathbf{I}) \mathbf{I}$$

имеем:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^p = \omega \left[ -\frac{1}{3\alpha^p} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{T}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{\alpha^p} ((\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p) : \frac{\mathbf{T}^p : \mathbf{I}}{3} \mathbf{I} \right] + \\ + \bar{\omega} \left[ -\frac{1}{3\alpha^p} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{T}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{\alpha^p} ((\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p) : \mathbf{T}^p \right] = \\ = -\frac{1}{3\alpha^p} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{T}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{\alpha^p} ((\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p) : \left( \omega \frac{\mathbf{T}^p : \mathbf{I}}{3} \mathbf{I} + \bar{\omega} \mathbf{T}^p \right). \quad (2.53) \end{aligned}$$

Обозначим

$$\mathbf{K}^p = \frac{1}{\alpha^p} \left( \omega \frac{\mathbf{T}^p : \mathbf{I}}{3} \mathbf{I} + \bar{\omega} \mathbf{T}^p \right). \quad (2.54)$$

Обратим внимание, что

$$\mathbf{K}^p : \mathbf{I} = \frac{1}{\alpha^p} \left( \omega \frac{\mathbf{T}^p : \mathbf{I}}{3} \mathbf{I} : \mathbf{I} + \bar{\omega} \mathbf{T}^p : \mathbf{I} \right) = \frac{1}{\alpha^p} \mathbf{T}^p : \mathbf{I}.$$

Тогда уравнение (2.53) преобразуется к виду

$$\mathcal{A}^p = -\frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{K}^p : \mathbf{I} - \mathbf{K}^p : ((\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p). \quad (2.55)$$

Отметим, что тензор  $\mathbf{K}^p$  симметричный, поскольку тензор  $\mathbf{T}^p$  симметричен.

#### 2.2.4. Энтропийное неравенство

Система уравнений (2.34) должна быть дополнена энтропийным неравенством в нужной форме. Это энтропийное неравенство не является следствием приведенных выше уравнений модели и является ее независимым компонентом. Постулируем его в виде неравенства Клаузиуса-Дюгема вида:

$$\sum_{p=1,2} \rho^p \dot{\eta}^p \geq 0. \quad (2.56)$$

Здесь  $\eta^p$  — энтропия фазы  $p$ . Для удобства дальнейших вычислений перейдем от внутренней энергии к свободной энергии  $\psi^p = \psi^p(\theta^p, \mathbf{G}^p, \alpha^p)$  с помощью преобразования

Лежандра по паре переменных  $(\eta^p, \theta^p)$ , где  $\theta^p$  — температура фазы,

$$\psi^p = \mathcal{U}^p - \theta^p \eta^p. \quad (2.57)$$

Отсюда имеем:

$$\rho^p \dot{\eta}^p = \frac{1}{\theta^p} \left( \rho^p \dot{\mathcal{U}}^p - \rho^p \dot{\psi}^p - \rho^p \eta^p \dot{\theta}^p \right).$$

Тогда неравенство Клаузиуса-Дюгема (2.56) с учетом уравнения баланса внутренней энергии (2.34с) примет вид

$$\sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} \left[ \mathbf{T}^p : (\nabla \otimes \mathbf{u}^p) - \mathbf{T}^I : ((\mathbf{u}^I - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p) + \right. \\ \left. + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p - \rho^p \dot{\psi}^p - \rho^p \eta^p \dot{\theta}^p \right] \geq 0. \quad (2.58)$$

В соответствии с процедурой Колмана-Нолла данное неравенство рассматривается как ограничение на вид определяющих соотношений, при которых любой процесс будет допустимым. Для конкретизации видов процессов в форме законов сохранения необходимо задать соответствующие определяющие соотношения.

### 2.2.5. Процедура Колмана-Нолла

#### Диссипативное неравенство

Перейдем к анализу возможного вида определяющих соотношений. Будем считать, что множество параметров состояния модели имеет вид:

$$\zeta = [\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}]; \quad \zeta^p = \{\theta^p, \mathbf{G}^p, \alpha^p\}, \quad p = 1, 2.$$

Постулируем, что

$$\psi^p = \psi^p(\zeta^p), \quad \mathbf{T}^p = \mathbf{T}^p(\zeta^p), \quad \eta^p = \eta^p(\zeta^p), \\ \mathcal{S}_\alpha^p = \mathcal{S}_\alpha^p(\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}), \quad \mathcal{S}_u^p = \mathcal{S}_u^p(\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}), \quad \mathcal{S}_E^p = \mathcal{S}_E^p(\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)}). \quad (2.59)$$

*Замечание 2.2.5.* Отметим, что в более общем случае могут иметь место зависимости  $\psi^p = \psi^p(\zeta^{(1)}, \zeta^{(2)})$ . Такой случай далее не рассматривается.

С учетом соотношений (2.59) для материальной производной свободной энергии придем к:

$$\dot{\psi}^p = \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha^p} \dot{\alpha}^p + \frac{\partial \psi^p}{\partial \theta^p} \dot{\theta}^p + \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} : \dot{\mathbf{G}}^p.$$



Подставим полученное выражение в (2.58) и получим:

$$\sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} \left[ \mathbf{T}^p : (\nabla \otimes \mathbf{u}^p) - \mathbf{T}^1 : ((\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p) + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p - \right. \\ \left. - \rho^p \eta^p \dot{\theta}^p - \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha^p} \dot{\alpha}^p - \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \theta^p} \dot{\theta}^p - \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} : \dot{\mathbf{G}}^p \right] \geq 0.$$

Далее, используя эволюционное уравнение (2.29) для метрического тензора деформации, получим

$$\sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} \left[ \mathbf{T}^p : (\nabla \otimes \mathbf{u}^p) - \mathbf{T}^1 : ((\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p) + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p - \rho^p \eta^p \dot{\theta}^p - \right. \\ \left. - \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha^p} \dot{\alpha}^p - \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \theta^p} \dot{\theta}^p + 2\rho^p \mathbf{G}^p \cdot \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} : (\nabla \otimes \mathbf{u}^p) - \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} : \Phi^p \right] \geq 0. \quad (2.60)$$

Корректная система определяющих соотношений является частным решением неравенства (2.60). Конкретный пример такого решения, соответствующего рассматриваемой модели, выводится ниже.

### «Внутренние» параметры фаз

Определим следующие величины:

$$\beta^p := \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha^p} \quad (2.61)$$

— конфигурационное давление;

$$\mathbf{T}^p := -2\rho^p \mathbf{G}^p \cdot \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} \quad (2.62)$$

— тензор напряжений, определяемый по формуле Мурнагана;

$$\eta^p := -\frac{\partial \psi^p}{\partial \theta^p} \quad (2.63)$$

— энтропия.

С учетом введенных определений выражение (2.60) сводится к неравенству

$$\sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} \left[ -\mathbf{T}^1 : ((\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p) + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p - \beta^p \dot{\alpha}^p - \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} : \Phi^p \right] \geq 0. \quad (2.64)$$

Данное выражение представляет собой второе начало термодинамики для смеси с учетом законов сохранения и определяющих соотношений (2.61), (2.62) и (2.63). Отметим, что следствием (2.62) является соотношение

$$\frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} = -\frac{1}{2\rho^p} (\mathbf{G}^p)^{-1} \cdot \mathbf{T}^p. \quad (2.65)$$

Подставим далее в (2.64) соотношения (2.38) и (2.65), с учетом (2.50) и (2.55), можно прийти (см. [21]) к неравенству

$$\sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} [(-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^p) : ((\mathbf{u}^I - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p) - \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathcal{K}^p : \mathbf{I} + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p] \geq 0, \quad (2.66)$$

где введено обозначение

$$\mathcal{K}^p = \mathbf{K}^p + \beta^p \mathbf{I}. \quad (2.67)$$

### «Обменные» слагаемые

Единственными неопределенными соотношениями являются выражения для обменных слагаемых  $\mathcal{S}_\alpha^p$ ,  $\mathcal{S}_E^p$  и  $\mathcal{S}_u^p$ , а также  $\mathbf{T}^I$  и  $\mathbf{u}^I$ . Для их определения введем следующие обозначения:

$$\mathcal{D}_1 = \sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} [(-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^p) : ((\mathbf{u}^I - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p)], \quad (2.68)$$

$$\mathcal{D}_2 = \sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} \left[ -\frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathcal{K}^p : \mathbf{I} + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p \right]. \quad (2.69)$$

Тогда неравенство (2.66) примет вид:

$$\mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2 \geq 0.$$

Рассмотрим отдельные слагаемые последовательно.

**Первое слагаемое.** Будем считать, что в уравнении (2.68)

$$\mathcal{D}_1 = \sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} [(-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^p) : ((\mathbf{u}^I - \mathbf{u}^p) \otimes \nabla \alpha^p)] = 0. \quad (2.70)$$

Представим  $\mathbf{u}^I$  как линейную комбинацию скоростей фаз:

$$\mathbf{u}^I = \kappa^{(1)} \mathbf{u}^{(1)} + \kappa^{(2)} \mathbf{u}^{(2)}, \quad (2.71)$$

с пока неопределенными безразмерными коэффициентами  $\kappa^p$ , такими что

$$\kappa^{(1)} + \kappa^{(2)} = 1, \quad 0 \leq \kappa^p \leq 1, \quad p = 1, 2.$$

Тогда

$$\mathbf{u}^I - \mathbf{u}^{(1)} = \kappa^{(2)} (\mathbf{u}^{(2)} - \mathbf{u}^{(1)}), \quad \mathbf{u}^I - \mathbf{u}^{(2)} = -\kappa^{(1)} (\mathbf{u}^{(2)} - \mathbf{u}^{(1)}). \quad (2.72)$$

После подстановки (2.72) в (2.68) и перегруппировки слагаемых получим:

$$(\mathbf{u}^{(2)} - \mathbf{u}^{(1)}) \otimes \nabla \alpha^{(1)} : \left[ \frac{\kappa^{(2)}}{\theta^{(1)}} (-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^{(1)}) + \frac{\kappa^{(1)}}{\theta^{(2)}} (-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^{(2)}) \right] = 0. \quad (2.73)$$

Замечание 2.2.6. Условие (2.73) может быть записано в виде:

$$\mathbf{Z} : \mathbf{D} = 0,$$

где  $\mathbf{Z} = (\mathbf{u}^{(2)} - \mathbf{u}^{(1)}) \otimes \nabla \alpha^{(1)}$  и  $\mathbf{D} = \frac{\kappa^{(2)}}{\theta^{(1)}} (-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^{(1)}) + \frac{\kappa^{(1)}}{\theta^{(2)}} (-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^{(2)})$  и имеет смысл уравнения относительно  $\mathbf{D}$ . В силу того, что, по предположению, тензор  $\mathbf{D}$  не зависит от  $\mathbf{u}^p$  и  $\nabla \alpha^p$ , далее нас будет интересовать только его тривиальное решение  $\mathbf{D} := 0$ .

В соответствии с замечанием выше примем

$$\frac{\kappa^{(2)}}{\theta^{(1)}} (-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^{(1)}) + \frac{\kappa^{(1)}}{\theta^{(2)}} (-\mathbf{T}^I + \mathcal{K}^{(2)}) = 0.$$

Таким образом, для интерфейсного напряжения имеем

$$\mathbf{T}^I = \frac{\mathcal{K}^{(1)} \kappa^{(2)} \theta^{(2)} + \mathcal{K}^{(2)} \kappa^{(1)} \theta^{(1)}}{\kappa^{(1)} \theta^{(1)} + \kappa^{(2)} \theta^{(2)}}. \quad (2.74)$$

**Второе слагаемое.** Считаем, что в (2.69)

$$\mathcal{D}_2 = \sum_{p=1,2} \frac{1}{\theta^p} \left[ -\frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathcal{K}^p : \mathbf{I} + \mathcal{S}_E^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p \right] \geq 0. \quad (2.75)$$

Постулируем следующий вид обменных слагаемых

$$\mathcal{S}_\alpha^p = -\xi^p \left( \pi^I + \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} \right), \quad \xi^p \geq 0, \quad (2.76a)$$

$$\mathcal{S}_u^p = \chi^p (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^p), \quad \chi^p \geq 0, \quad (2.76b)$$

$$\mathcal{S}_E^p = \mathcal{S}_{1E}^p + \mathcal{S}_{2E}^p + \mathcal{S}_{3E}^p, \quad (2.76c)$$

$$\mathcal{S}_{1E}^p = \chi^p \mathbf{w}^I \cdot (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^p), \quad (2.76d)$$

$$\mathcal{S}_{2E}^p = \xi^p \pi^I \left( \pi^I + \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} \right), \quad (2.76e)$$

$$\mathcal{S}_{3E}^p = \phi (\theta^{\bar{p}} - \theta^p), \quad \phi \geq 0, \quad (2.76f)$$

где  $\mathbf{w}^I$  — какая-либо («вторая интерфейсная») скорость,  $\pi^I$  — какое-либо («второе интерфейсное») давление,  $\bar{p} = 1$ , если  $p = 2$ , и  $\bar{p} = 2$ , если  $p = 1$ .

С учетом (2.76b) и (2.76d) получим:

$$\mathcal{S}_{1E}^p - \mathbf{u}^p \cdot \mathcal{S}_u^p = \chi^p (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^p) \cdot (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^p) \geq 0.$$

Аналогично, из соотношений (2.76a) и (2.76e) следует, что

$$\mathcal{S}_{2E}^p - \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathcal{K}^p : \mathbf{I} = \xi^p \left( \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} + \pi^I \right)^2 \geq 0.$$

Рассмотрим теперь слагаемое  $\mathcal{S}_{3E}^p$ . Для него с учетом (2.76f) верно неравенство

$$\sum_{p=1,2} \frac{\mathcal{S}_{3E}^p}{\theta^p} = \frac{\mathcal{S}_{3E}^p}{\theta^p} + \frac{\mathcal{S}_{3E}^{\bar{p}}}{\theta^{\bar{p}}} = \frac{\phi(\theta^{\bar{p}} - \theta^p)^2}{\theta^p \theta^{\bar{p}}} \geq 0.$$

Таким образом, из условий (2.75), (2.33) и (2.37) следует вид обменных слагаемых:

$$\mathcal{S}_E^p = \chi^p \mathbf{w}^I \cdot (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^p) + \xi^p \pi^I \left( \pi^I + \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} \right) + \phi(\theta^{\bar{p}} - \theta^p), \quad (2.77a)$$

$$\mathcal{S}_u^p = \chi^p (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^p), \quad (2.77b)$$

$$\mathcal{S}_\alpha^p = -\xi^p \left( \pi^I + \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} \right). \quad (2.77c)$$

Из условий (2.33) для обменного слагаемого в импульсе получим

$$\mathcal{S}_u^p + \mathcal{S}_u^{\bar{p}} = \chi^p (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^p) + \chi^{\bar{p}} (\mathbf{w}^I - \mathbf{u}^{\bar{p}}) = 0. \quad (2.78)$$

Отсюда

$$\mathbf{w}^I = \frac{\chi^p \mathbf{u}^p + \chi^{\bar{p}} \mathbf{u}^{\bar{p}}}{\chi^p + \chi^{\bar{p}}}. \quad (2.79)$$

Из условий (2.37) следует, что

$$\mathcal{S}_\alpha^p + \mathcal{S}_\alpha^{\bar{p}} = -\pi^I (\xi^p + \xi^{\bar{p}}) - \left( \frac{1}{3} \xi^p \mathcal{K}^p : \mathbf{I} + \frac{1}{3} \xi^{\bar{p}} \mathcal{K}^{\bar{p}} : \mathbf{I} \right) = 0.$$

Отсюда

$$\pi^I = -\frac{1}{3} \frac{\xi^p \mathcal{K}^p + \xi^{\bar{p}} \mathcal{K}^{\bar{p}}}{\xi^p + \xi^{\bar{p}}} : \mathbf{I}. \quad (2.80)$$

Введем следующие обозначения:

$$\nu^p = \frac{\chi^p}{\chi^p + \chi^{\bar{p}}}, \quad \varsigma^p + \varsigma^{\bar{p}} = 1, \quad \mu^p = \frac{\xi^p}{\xi^p + \xi^{\bar{p}}}, \quad \varrho^p + \varrho^{\bar{p}} = 1.$$

Тогда уравнения (2.79) и (2.80) приобретут вид:

$$\mathbf{w}^I = \nu^p \mathbf{u}^p + \nu^{\bar{p}} \mathbf{u}^{\bar{p}}, \quad \nu^p + \nu^{\bar{p}} = 1, \quad (2.81)$$

$$\pi^I = -\frac{1}{3} (\mu^p \mathcal{K}^p + \mu^{\bar{p}} \mathcal{K}^{\bar{p}}) : \mathbf{I}, \quad \mu^p + \mu^{\bar{p}} = 1. \quad (2.82)$$

При выборе «вторых интерфейсных» слагаемых согласно (2.81) и (2.82) условие на  $\mathcal{S}_E$  из (2.33) также выполнено.

*Замечание 2.2.7.* Отметим, что при таком выборе  $\mathbf{w}^I$  и  $\pi^I$  не исключается вариант, когда

$$\mathbf{w}^I = \mathbf{u}^I, \quad \pi^I = -\frac{1}{3} \mathbf{T}^I : \mathbf{I}.$$

При этом в итоговой системе остается одно интерфейсное напряжение и одна интерфейсная скорость.

Из (2.81) и (2.82) для обменного слагаемого  $\mathcal{S}_\alpha^p$  получим:

$$\mathcal{S}_\alpha^p = -\xi^p \left( \pi^I + \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} \right) = -\xi^p \mu^{\bar{p}} \left( \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathcal{K}^{\bar{p}} : \mathbf{I} \right). \quad (2.83)$$

Обозначим

$$\xi = \xi^p \mu^{\bar{p}} = \frac{\xi^p \xi^{\bar{p}}}{\xi^p + \xi^{\bar{p}}}. \quad (2.84)$$

Аналогично, для обменного слагаемого  $\mathcal{S}_u^p$  можно получить:

$$\mathcal{S}_u^p = \chi^p \nu^{\bar{p}} (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p). \quad (2.85)$$

Обозначим

$$\chi = \chi^p \nu^{\bar{p}} = \frac{\chi^p \chi^{\bar{p}}}{\chi^p + \chi^{\bar{p}}}. \quad (2.86)$$

Для обменного слагаемого  $\mathcal{S}_E^p$ :

$$\mathcal{S}_E^p = \chi^p \nu^{\bar{p}} \mathbf{w}^I \cdot (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p) + \xi^p \mu^{\bar{p}} \pi^I \left( \frac{1}{3} \mathcal{K}^p : \mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathcal{K}^{\bar{p}} : \mathbf{I} \right) + \phi (\theta^{\bar{p}} - \theta^p). \quad (2.87)$$

С учетом полученных соотношений релаксационные слагаемые (2.83), (2.85) и (2.87) приобретают вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\alpha^p &= -\frac{1}{3} \xi (\mathcal{K}^p - \mathcal{K}^{\bar{p}}) : \mathbf{I}, \\ \mathcal{S}_u^p &= \chi (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p), \\ \mathcal{S}_E^p &= \chi \mathbf{w}^I \cdot (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p) + \frac{1}{3} \xi \pi^I (\mathcal{K}^p - \mathcal{K}^{\bar{p}}) : \mathbf{I} + \phi (\theta^{\bar{p}} - \theta^p), \end{aligned}$$

где  $\mathbf{w}^I$  и  $\pi^I$  определены согласно (2.81) и (2.82).

### 2.2.6. Замкнутая формулировка модели

Замкнутая формулировка модели включает следующие соотношения:

- система уравнений (2.32) в консервативной форме, выражающую законы сохранения массы, импульса и энергии:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho^p + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p) &= 0, \\ \partial_t (\rho^p \mathbf{u}^p) + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p) &= -\mathbf{T}^I \cdot \nabla \alpha^p + \mathcal{S}_u^p, \\ \partial_t (\rho^p E^p) + \nabla \cdot (\rho^p E^p \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p \cdot \mathbf{u}) &= -\mathbf{T}^I : (\mathbf{u}^I \otimes \nabla \alpha^p) + \mathcal{S}_E^p, \end{aligned}$$

- определяющие соотношения (2.74) для интерфейсного тензора напряжений

$$\mathbf{T}^I = \frac{\boldsymbol{\kappa}^{(1)}\kappa^{(2)}\boldsymbol{\theta}^{(2)} + \boldsymbol{\kappa}^{(2)}\kappa^{(1)}\boldsymbol{\theta}^{(1)}}{\kappa^{(1)}\boldsymbol{\theta}^{(1)} + \kappa^{(2)}\boldsymbol{\theta}^{(2)}},$$

где

$$\boldsymbol{\kappa}^p = \frac{1}{\alpha^p} \left( \omega \frac{\mathbf{T}^p : \mathbf{I}}{3} \mathbf{I} + (1 - \omega) \mathbf{T}^p \right) + \beta^p \mathbf{I}, \quad \omega \in [0, 1].$$

- определяющие соотношения (2.71) для интерфейсной скорости

$$\mathbf{u}^I = \kappa^{(1)} \mathbf{u}^{(1)} + \kappa^{(2)} \mathbf{u}^{(2)},$$

где  $\kappa^p$  — безразмерные параметры, такие, что

$$\kappa^{(1)} + \kappa^{(2)} = 1, \quad 0 \leq \kappa^p \leq 1, \quad p = 1, 2.$$

- обменные слагаемые (2.77)

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_E^p &= \chi \mathbf{w}^I \cdot (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p) + \frac{1}{3} \xi \pi^I (\boldsymbol{\kappa}^p - \boldsymbol{\kappa}^{\bar{p}}) : \mathbf{I} + \phi (\boldsymbol{\theta}^{\bar{p}} - \boldsymbol{\theta}^p), \\ \mathcal{S}_u^p &= \chi (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p), \end{aligned}$$

где  $\mathbf{w}^I$  — «вторая интерфейсная» скорость, которая определена согласно (2.81):

$$\mathbf{w}^I = \nu^p \mathbf{u}^p + \nu^{\bar{p}} \mathbf{u}^{\bar{p}}, \quad \nu^p + \nu^{\bar{p}} = 1,$$

$\pi^I$  — «второе интерфейсное» давление, которое определено согласно (2.82):

$$\pi^I = -\frac{1}{3} (\mu^p \boldsymbol{\kappa}^p + \mu^{\bar{p}} \boldsymbol{\kappa}^{\bar{p}}) : \mathbf{I}, \quad \mu^p + \mu^{\bar{p}} = 1.$$

- определяющие уравнения (2.21) для тензора дисторсии фазы  $p = 1, 2$ :

$$\dot{\mathbf{A}}^p = -(\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{A}^p + \mathbf{l}^p,$$

где обменное слагаемое  $\mathbf{l}^p$  определено согласно (2.47) и имеет вид:

$$\mathbf{l}^p = -\omega \frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p - \bar{\omega} \frac{1}{\alpha^p} \left[ \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^I) \otimes \nabla \alpha^p \right] \cdot \mathbf{A}^p.$$

- определяющее соотношение (2.35) для объемной доли  $\alpha_p$  фазы  $p = 1, 2$ :

$$\partial_t \alpha^p + \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p = \mathcal{S}_\alpha^p, \quad p = 1, 2,$$

где обменное слагаемое определено согласно

$$\mathcal{S}_\alpha^p = -\frac{1}{3}\xi(\mathcal{K}^p - \mathcal{K}^{\bar{p}}) : \mathbf{I}.$$

Здесь  $\pi^1$  — какое-либо («второе интерфейсное») давление, которое определено согласно (2.82).

- уравнение состояния для каждой из фаз  $p = 1, 2$ , которое имеет вид заданной зависимости внутренней или свободной энергии фазы от своих естественных переменных,

$$\mathcal{U}^p = \mathcal{U}(\mathbf{G}^p, \eta^p, \alpha^p), \quad \psi^p = \psi^p(\mathbf{G}^p, \theta^p, \alpha^p).$$

- определяющие соотношения для тензора напряжений  $\mathbf{T}^p$  («формула Мурнагана») (2.62), энтропии фаз  $\eta^p$  (2.63) и конфигурационного давления  $\beta^p$  (2.61), справедливые в общем случае:

$$\mathbf{T}^p = -2\rho^p \mathbf{G}^p \cdot \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p}, \quad \eta^p = -\frac{\partial \psi^p}{\partial \theta^p}, \quad \beta^p = \rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \alpha^p}.$$

Таким образом, наиболее общая форма модели имеет вид:

$$\partial_t \alpha^p + \mathbf{u}^1 \cdot \nabla \alpha^p = -\frac{1}{3}\xi(\mathcal{K}^p - \mathcal{K}^{\bar{p}}) : \mathbf{I}, \quad (2.88a)$$

$$\partial_t \rho^p + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p) = 0, \quad (2.88b)$$

$$\partial_t (\rho^p \mathbf{u}^p) + \nabla \cdot (\rho^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p) = -\mathbf{T}^1 \cdot \nabla \alpha^p + \chi(\mathbf{u}_k^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p), \quad (2.88c)$$

$$\partial_t (\rho^p E^p) + \nabla \cdot (\rho^p E^p \mathbf{u}^p - \mathbf{T}^p \cdot \mathbf{u}) = -\mathbf{T}^1 : (\mathbf{u}^1 \otimes \nabla \alpha^p) + \quad (2.88d)$$

$$+ \chi \mathbf{w}^1 \cdot (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p) + \frac{1}{3}\xi \pi^1 (\mathcal{K}^p - \mathcal{K}^{\bar{p}}) : \mathbf{I} + \phi(\theta^{\bar{p}} - \theta^p),$$

$$\dot{\mathbf{A}}^p = -(\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{A}^p - \quad (2.88e)$$

$$- \omega \frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p - \bar{\omega} \frac{1}{\alpha^p} \left[ \frac{1}{3} \mathcal{S}_\alpha^p \mathbf{I} + (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^1) \otimes \nabla \alpha^p \right] \cdot \mathbf{A}^p.$$

Отметим, что, как показано в [21],

- система законов сохранения для каждой из фаз является материально индифферентной;
- система законов сохранения для смеси является материально индифферентной;
- при выборе интерфейсной скорости как линейной комбинации скоростей фаз уравнение совместности деформаций для каждой из фаз материально индифферентно.

Это обеспечивает выполнение принципов материальной объективности для системы уравнений модели и определяющих соотношений.

## § 2.3. Частные случаи

### 2.3.1. Модели типа Баера-Нунциато с шаровым тензором напряжений

В настоящем разделе рассматриваются частные случаи общей модели (2.88) и показывается, что сформулированная модель сводится к частным случаям многофазных моделей, известных в современной литературе.

Будем считать, что тензор напряжений модели является шаровым. Для получения уравнений этой модели достаточно допустить зависимость свободной энергии только от единственного инварианта тензора деформаций Фингера, а именно  $I_3$ , см. (2.7).

В самом деле, в силу того, что свободная энергия является скалярной функцией тензорного аргумента, ее зависимость от компонент тензора дисторсии или иного тензора, являющегося мерой деформации, может быть задана только как функция от инвариантов этого тензора, см., например, [88]. Другими словами,  $\psi^p = \psi^p(\mathbf{G}^p, \dots) = \psi^p(I_1^p, I_2^p, I_3^p, \dots)$ , где  $I_1$ ,  $I_2$  и  $I_3$  определены согласно (2.7).

Будем считать далее, что  $\psi^p = \psi^p(I_3^p, \dots)$ . В этом случае формула Мурнагана (2.62) приобретает вид:

$$\mathbf{T}^p := -2\rho^p \mathbf{G}^p \cdot \frac{\partial \psi^p}{\partial \mathbf{G}^p} = -2\rho^p \frac{\partial \psi^p}{\partial I_3^p} \mathbf{G}^p : \frac{\partial I_3^p}{\partial \mathbf{G}^p}.$$

Рассмотрим производную инварианта по компонентам тензора:

$$\frac{\partial I_3^p}{\partial \mathbf{G}^p} = \frac{\partial \det \mathbf{G}^p}{\partial \mathbf{G}^p} = \det \mathbf{G}^p (\mathbf{G}^p)^{-T}.$$

Тогда, с учетом симметричности тензора  $\mathbf{G}$ :

$$\mathbf{T}^p = -2\rho^p \det \mathbf{G}^p \frac{\partial \psi^p}{\partial I_3^p} \mathbf{G}^p \cdot (\mathbf{G}^p)^{-T} = -2\rho^p \det \mathbf{G}^p \frac{\partial \psi^p}{\partial I_3^p} \mathbf{I}.$$

Поскольку  $I_3^p = (\gamma^p/\gamma_0^p)^2$ , то  $\psi^p = \psi^p(\gamma^p, \dots)$ , откуда

$$\frac{\partial \psi^p}{\partial I_3^p} = \frac{\partial \psi^p}{\partial \gamma^p} \frac{\partial \gamma^p}{\partial I_3^p} = \frac{\partial \psi^p}{\partial \gamma^p} \frac{(\gamma_0^p)^2}{2\gamma^p}$$

и

$$\mathbf{T}^p = -2\rho^p \det \mathbf{G}^p \frac{\partial \psi^p}{\partial \gamma^p} \mathbf{I} \frac{(\gamma_0^p)^2}{2\gamma^p} = \frac{-2\rho^p}{2\gamma^p} \left( (\gamma_0^p)^2 \det \mathbf{G}^p \right) \frac{\partial \psi^p}{\partial \gamma^p} \mathbf{I}.$$

Отсюда

$$\mathbf{T}^p = -\alpha^p (\gamma^p)^2 \frac{\partial \psi^p}{\partial \gamma^p} \mathbf{I} = -\alpha^p p^p \mathbf{I},$$

где

$$p^p = (\gamma^p)^2 \frac{\partial \psi^p}{\partial \gamma^p} \tag{2.89}$$



— давление фазы  $p$ . В этом случае имеем  $\mathbf{T}^p : \mathbf{I} = -3\alpha^p p^p$ , и из (2.54) следует, что

$$\mathbf{K}^p = \frac{1}{\alpha^p} \left( \omega \frac{\mathbf{T}^p : \mathbf{I}}{3} \mathbf{I} + \bar{\omega} \mathbf{T}^p \right) = \frac{1}{\alpha^p} (\omega (-\alpha^p p^p) \mathbf{I} + \bar{\omega} (-\alpha^p p^p) \mathbf{I}) = -p^p \mathbf{I}.$$

Соответственно, из (2.67) имеем

$$\mathbf{K}^p = \mathbf{K}^p + \beta^p \mathbf{I} = [-p^p + \beta] \mathbf{I}, \quad \frac{1}{3} \mathbf{K}^p : \mathbf{I} = -p^p + \beta^p.$$

*Замечание 2.3.1.* В ряде случаев, в зависимости от постановки задачи, конфигурационное давление принимается равным нулю. Это соответствует случаю, когда свободная энергия фазы явно не зависит от ее объемной доли, то есть  $\psi^p(\alpha^p, \gamma^p, \theta^p) = \tilde{\psi}^p(\gamma^p, \theta^p)$ . Ненулевое конфигурационное давление характерно для случаев, когда одна из фаз — дисперсная гранулированная среда; в этом случае оно интерпретируется как межгранулярное давление, связанное с механическим взаимодействием отдельных дисперсных частиц.

Далее для простоты будем считать, что уравнение состояния фазы не зависит от объемной доли, то есть  $\mathcal{U}^p = \mathcal{U}^p(\gamma^p, \eta^p)$ , откуда, как следствие (2.61), конфигурационное давление фаз  $\beta^p \equiv 0$ . В этом случае интерфейсный тензор напряжений (2.74) также является шаровым и приобретает вид:

$$\mathbf{T}^1 = -p^1 \mathbf{I}, \quad p^1 = \frac{p^{(1)} \kappa^{(2)} \theta^{(2)} + p^{(2)} \kappa^{(1)} \theta^{(1)}}{\kappa^{(1)} \theta^{(1)} + \kappa^{(2)} \theta^{(2)}}.$$

Таким образом, получаем, что напряжения среды зависят только от шаровой части тензора напряжений, то есть являются давлением. Помимо этого, состояние среды не зависит явно от компонент тензора дисторсии, а зависит только от плотности. Поэтому уравнение совместности деформации является избыточным для этой системы — достаточно использовать уравнение для закона сохранения массы (которое, по существу, является уравнением для инварианта  $I_3$  тензора Фингера  $\mathbf{G}^p$ ).

В результате система уравнений (2.88) переходит в систему уравнений Баера-Нунциато в общем виде, рассмотренном, например, в [1, 3, 4, 6, 7, 70, 91, 92] (без учета обмена массой между фазами, релаксации химического потенциала и нулевым конфигурационным давлением). Результирующая модель с шаровым тензором напряжений будет иметь вид:

$$\frac{\partial \alpha^p}{\partial t} + \mathbf{u}^1 \cdot \nabla \alpha^p = \xi (p^p - p^{\bar{p}}), \quad (2.90a)$$

$$\frac{\partial \alpha^p \gamma^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p) = 0, \quad (2.90b)$$

$$\frac{\partial \alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p + \alpha^p p^p \mathbf{I}) - p^1 \nabla \alpha^p = \chi (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p), \quad (2.90c)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha^p \gamma^p E^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p (\gamma^p E^p + p^p) \mathbf{u}^p) - p^1 \mathbf{u}^1 \cdot \nabla \alpha^p = \\ = \chi (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{w}^1 + \xi (p^{\bar{p}} - p^p) \pi^1 + \phi (\theta^{\bar{p}} - \theta^p), \end{aligned} \quad (2.90d)$$

где

$$\mathbf{u}^I = \kappa^{(1)}\mathbf{u}^{(1)} + \kappa^{(2)}\mathbf{u}^{(2)}, \quad p^I = \frac{p^{(1)}\kappa^{(2)}\theta^{(2)} + p^{(2)}\kappa^{(1)}\theta^{(1)}}{\kappa^{(1)}\theta^{(1)} + \kappa^{(2)}\theta^{(2)}}. \quad (2.91)$$

$$\mathbf{w}^I = \nu^{(1)}\mathbf{u}^{(1)} + \nu^{(2)}\mathbf{u}^{(2)}, \quad \pi^I = \mu^{(1)}p^{(1)} + \mu^{(2)}p^{(2)}, \quad (2.92)$$

$$\kappa^{(1)} + \kappa^{(2)} = 1, \quad \nu^{(1)} + \nu^{(2)} = 1, \quad \mu^{(1)} + \mu^{(2)} = 1.$$

*Замечание 2.3.2.* Наиболее распространены модели с одной интерфейсной скоростью и одним интерфейсным давлением. Отметим, что, тем не менее, модели с двумя интерфейсными давлениями и/или двумя интерфейсными скоростями встречаются в литературе. В частности, в [7] и [6] утверждается, что это решает ряд проблем с термодинамической согласованностью модели. В работах [6,93] представлены обзоры известных моделей замыкания. Модель с двумя интерфейсными давлениями описана в [94].

**Модель Baer [1]** Выберем в релаксационных слагаемых следующие «вторые интерфейсные» скорости и давления, совпадающие с интерфейсными давлениями и скоростями:  $\mathbf{w}^I = \mathbf{u}^I$  и  $\pi^I = p^I$ . Тогда система уравнений (2.88) переходит в систему уравнений Баера-Нунциато из классической работы [1] при выборе интерфейсных слагаемых как  $\mathbf{w}^I = \mathbf{u}^{(1)}$  и  $p^I = p^{(2)}$ , отсутствии обмена массой, релаксации и химического потенциала.

**Модель Drew [2]** В случае выбора интерфейсных слагаемых согласно (2.91) получим вид уравнений, соответствующий модели, предложенной в работе [2].

**Модель Coquel [3]** Для получения модели из [3,70] положим

$$\mathbf{w}^I = \mathbf{u}^I, \quad \pi^I = -\frac{1}{3}\mathbf{T}^I : \mathbf{I} = p^I.$$

В работе [3] утверждается, что для линейной вырожденности характеристического поля (для его соответствия контактному разрыву), ассоциированного с собственным значением  $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{u}^I$ , коэффициенты в интерфейсных слагаемых (2.91) и (2.92) для модели (2.90) должны иметь вид:

$$\kappa^p = \frac{\alpha^p \gamma^p}{\rho} \quad \text{или} \quad \kappa^{(1)}(1 - \kappa^{(2)}) = 0. \quad (2.93)$$

В работе [3] использован следующий вид  $p^I$ :

$$p^I = \frac{p^{(1)}\kappa^{(2)}a^{(1)} + p^{(2)}\kappa^{(1)}a^{(2)}}{\kappa^{(1)}a^{(2)} + \kappa^{(2)}a^{(1)}}. \quad (2.94)$$

Далее, для определения коэффициента  $a^p$  рассмотрим систему соотношений из [3] (некоторые переменные были переобозначены по сравнению с оригинальной работой):

$$\Gamma^p p^p = \left( \frac{p^p}{\gamma^p} - \gamma^p \frac{\partial \mathcal{U}^p}{\partial \gamma^p} \right) \left( \frac{\partial \mathcal{U}^p}{\partial p^p} \right)^{-1}, \quad (2.95)$$

$$\Gamma^p p^p \frac{\partial s^p}{\partial p^p} + \gamma^p \frac{\partial s^p}{\partial \gamma^p} = 0, \quad (2.96)$$

$$a^p = (s^p)^{-1} \left( \frac{\partial s^p}{\partial p^p} \right) \left( \frac{\partial \mathcal{U}^p}{\partial p^p} \right)^{-1}, \quad (2.97)$$

$$\eta^p = \ln(s^p) + \iota^p(\alpha^p), \quad \iota^p(\alpha^p) = \iota^{\bar{p}}(\alpha^{\bar{p}}). \quad (2.98)$$

Из (2.98) получим

$$\frac{\partial \eta^p}{\partial \gamma^p} = \frac{\partial}{\partial \gamma^p} (\ln(s^p) + \iota^p(\alpha^p)) = (s^p)^{-1} \frac{\partial s^p}{\partial \gamma^p}. \quad (2.99)$$

С учетом (2.57) и (2.89) имеем

$$\frac{\partial \psi^p}{\partial \gamma^p} = \frac{\partial \mathcal{U}^p}{\partial \gamma^p} - \theta^p \frac{\partial \eta^p}{\partial \gamma^p} = \frac{p^p}{(\gamma^p)^2}.$$

Отсюда и из (2.99) и (2.96) следует, что

$$\frac{p^p}{\gamma^p} - \gamma^p \frac{\partial \mathcal{U}^p}{\partial \gamma^p} = -\gamma^p \theta^p \frac{\partial \eta^p}{\partial \gamma^p} = -\gamma^p \theta^p (s^p)^{-1} \frac{\partial s^p}{\partial \gamma^p} = \Gamma^p p^p \theta^p (s^p)^{-1} \frac{\partial s^p}{\partial p^p}. \quad (2.100)$$

Тогда с учетом (2.100) и (2.95) получим

$$\Gamma^p p^p = \Gamma^p p^p \theta^p (s^p)^{-1} \frac{\partial s^p}{\partial p^p} \left( \frac{\partial \mathcal{U}^p}{\partial p^p} \right)^{-1}.$$

Отсюда и из (2.97)

$$a^p = (s^p)^{-1} \frac{\partial s^p}{\partial p^p} \left( \frac{\partial \mathcal{U}^p}{\partial p^p} \right)^{-1} = (\theta^p)^{-1}. \quad (2.101)$$

С учетом (2.101) из (2.94) имеем

$$p^{\text{I}} = \frac{p^{(1)} \kappa^{(2)} \theta^{(2)} + p^{(2)} \kappa^{(1)} \theta^{(1)}}{\kappa^{(1)} \theta^{(1)} + \kappa^{(2)} \theta^{(2)}}. \quad (2.102)$$

Таким образом, полученная в данной работе модель (2.90) полностью соответствует модели, представленной в работе [3].

**Модель Карилла [4]** В работе [4] рассмотрен следующий вид модели в оригинальных обозначениях (при отсутствии массовых обменных слагаемых, то есть при  $\mathcal{C} = 0$ ):

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha^p}{\partial t} + \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p &= \frac{\alpha^p \alpha^{\bar{p}}}{\mu_c} (p^p - p^{\bar{p}}), \\ \frac{\partial \alpha^p \gamma^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p) &= 0, \\ \frac{\partial \alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p + \alpha^p p^p \mathbf{I}) - p^I \nabla \alpha^p &= \delta (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p), \\ \frac{\partial \alpha^p \gamma^p E^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p (\gamma^p E^p + p^p) \mathbf{u}^p) - p^I \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p &= \\ = -\frac{\alpha^p \alpha^{\bar{p}}}{\mu_c} (p^p - p^{\bar{p}}) p^{(2)} + \delta \mathbf{u}^{(1)} \cdot (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p) + \mathcal{H} (\theta^{\bar{p}} - \theta^p).\end{aligned}$$

Таким образом параметры модели [4] соответствуют следующему выбору параметров в модели (2.90):

$$\xi = \frac{\alpha^p \alpha^{\bar{p}}}{\mu_c}, \quad \chi = \delta, \quad \phi = \mathcal{H}, \quad \mathbf{w}^I = \mathbf{u}^I = \mathbf{u}^{(1)}, \quad \pi^I = p^I = p^{(2)}.$$

**Модель Соquel [5, 6]** Рассмотрим модель из работ [5, 6]. В этой работе

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha^p}{\partial t} + \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p &= \frac{\alpha^p \alpha^{\bar{p}}}{\Pi_0 \tau_P} (p^p - p^{\bar{p}}), \\ \frac{\partial \alpha^p \gamma^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p) &= 0, \\ \frac{\partial \alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p + \alpha^p p^p \mathbf{I}) - p^I \nabla \alpha^p &= \frac{\alpha^p \gamma^p \alpha^{\bar{p}} \gamma^{\bar{p}}}{\rho \tau_U} (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p), \\ \frac{\partial \alpha^p \gamma^p E^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p (\gamma^p E^p + p^p) \mathbf{u}^p) - p^I \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p &= \\ = \frac{\alpha^p \gamma^p \alpha^{\bar{p}} \gamma^{\bar{p}}}{\rho \tau_U} (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p) \cdot \frac{(\mathbf{u}^p + \mathbf{u}^{\bar{p}})}{2} + \frac{\alpha^p \gamma^p \mathcal{C}_v^p \alpha^{\bar{p}} \gamma^{\bar{p}} \mathcal{C}_v^{\bar{p}}}{\alpha^p \gamma^p \mathcal{C}_v^p + \alpha^{\bar{p}} \gamma^{\bar{p}} \mathcal{C}_v^{\bar{p}}} \frac{(\theta^{\bar{p}} - \theta^p)}{\tau_T}.\end{aligned}$$

Интерфейсные слагаемые  $\mathbf{u}^I$  и  $p^I$  выбраны в модели как:

$$\mathbf{u}^I = \kappa^{(1)} \mathbf{u}^{(1)} + \kappa^{(2)} \mathbf{u}^{(2)}, \quad p^I = \frac{p^{(1)} \kappa^{(2)} \theta^{(2)} + p^{(2)} \kappa^{(1)} \theta^{(1)}}{\kappa^{(1)} \theta^{(1)} + \kappa^{(2)} \theta^{(2)}}.$$

Данная модель соответствует следующему выбору параметров модели (2.90):

$$\begin{aligned}\xi &= \frac{\alpha^p \alpha^{\bar{p}}}{\Pi_0 \tau_P}, \quad \chi = \frac{\alpha^p \gamma^p \alpha^{\bar{p}} \gamma^{\bar{p}}}{\rho \tau_U}, \quad \phi = \frac{1}{\tau_T} \frac{\alpha^p \gamma^p \mathcal{C}_v^p \alpha^{\bar{p}} \gamma^{\bar{p}} \mathcal{C}_v^{\bar{p}}}{\alpha^p \gamma^p \mathcal{C}_v^p + \alpha^{\bar{p}} \gamma^{\bar{p}} \mathcal{C}_v^{\bar{p}}}, \\ \mathbf{w}^I &= \frac{(\mathbf{u}^p + \mathbf{u}^{\bar{p}})}{2}, \quad \pi^I = 0, \\ \mathbf{u}^I &= \kappa^{(1)} \mathbf{u}^{(1)} + \kappa^{(2)} \mathbf{u}^{(2)}, \quad p^I = \frac{p^{(1)} \kappa^{(2)} \theta^{(2)} + p^{(2)} \kappa^{(1)} \theta^{(1)}}{\kappa^{(1)} \theta^{(1)} + \kappa^{(2)} \theta^{(2)}}.\end{aligned}$$

**Модель Muller [7]** Рассмотрим модель из работы [7] в двухфазном случае. Эта модель имеет следующий вид (без релаксации температуры и обмена массой и химиче-

ского потенциала):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha^p}{\partial t} + \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p &= \alpha^p \chi_P (p^p - p), \\
\frac{\partial \alpha^p \gamma^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p) &= 0, \\
\frac{\partial \alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p \gamma^p \mathbf{u}^p \otimes \mathbf{u}^p + \alpha^p p^p \mathbf{I}) - p^I \nabla \alpha^p &= \chi_V \alpha^p \rho^p (\mathbf{u} - \mathbf{u}^p), \\
\frac{\partial \alpha^p \gamma^p E^p}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha^p (\gamma^p E^p + p^p) \mathbf{u}^p) - p^I \mathbf{u}^I \cdot \nabla \alpha^p &= \\
&= \chi_V \alpha^p \rho^p (\mathbf{u} - \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{u} + \alpha^p \chi_{PP} (p^p - p),
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
p &= \alpha^p p^p + \alpha^{\bar{p}} p^{\bar{p}}, \quad \mathbf{u} = \frac{\alpha^p \rho^p \mathbf{u}^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}} \mathbf{u}^{\bar{p}}}{\alpha^p \rho^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}}, \\
\mathbf{u}^I &= \frac{\alpha^p \rho^p \mathbf{u}^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}} \mathbf{u}^{\bar{p}}}{\alpha^p \rho^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}}, \quad p^I = p^p \left(1 - \frac{\alpha^p \rho^p \theta^p}{\rho \theta}\right) + p^{\bar{p}} \left(1 - \frac{\alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}} \theta^{\bar{p}}}{\rho \theta}\right), \\
\theta &= \frac{\alpha^p \rho^p \theta^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}} \theta^{\bar{p}}}{\alpha^p \rho^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}}, \quad \rho = \alpha^p \rho^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}.
\end{aligned}$$

Подставим соответствующие обозначения в релаксационные слагаемые:

$$\begin{aligned}
\alpha^p \chi_P (p^p - p) &= \alpha^p \chi_P (p^p - \alpha^p p^p + \alpha^{\bar{p}} p^{\bar{p}}) = \alpha^p \alpha^{\bar{p}} \chi_P (p^p - p^{\bar{p}}), \\
\chi_V \alpha^p \rho^p (\mathbf{u} - \mathbf{u}^p) &= \chi_V \alpha^p \rho^p \left( \frac{\alpha^p \rho^p \mathbf{u}^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}} \mathbf{u}^{\bar{p}}}{\alpha^p \rho^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}} - \mathbf{u}^p \right) = \frac{\chi_V \alpha^p \rho^p \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}}{\rho} (\mathbf{u}^{\bar{p}} - \mathbf{u}^p), \\
\alpha^p \chi_{PP} (p^p - p) &= \alpha^p \chi_{PP} (p^p - \alpha^p p^p - \alpha^{\bar{p}} p^{\bar{p}}) = \alpha^p \alpha^{\bar{p}} \chi_{PP} (p^p - p^{\bar{p}}).
\end{aligned}$$

Таким образом, модель из работы [7] соответствует модели (2.90) с параметрами:

$$\begin{aligned}
\xi &= \alpha^p \alpha^{\bar{p}} \chi_P, \quad \chi = \frac{\chi_V \alpha^p \rho^p \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}}{\rho}, \quad \phi = 0, \\
\mathbf{w}^I &= \mathbf{u}^I = \frac{\alpha^p \rho^p \mathbf{u}^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}} \mathbf{u}^{\bar{p}}}{\alpha^p \rho^p + \alpha^{\bar{p}} \rho^{\bar{p}}}, \quad \pi^I = \alpha^p p^p + \alpha^{\bar{p}} p^{\bar{p}}, \\
p^I &= \frac{p^{(1)} \kappa^{(2)} \theta^{(2)} + p^{(2)} \kappa^{(1)} \theta^{(1)}}{\kappa^{(1)} \theta^{(1)} + \kappa^{(2)} \theta^{(2)}}, \quad \kappa^p = \frac{\alpha^p \rho^p}{\rho}.
\end{aligned}$$

Особо отметим, что в данной модели отсутствует релаксация по температуре.

### 2.3.2. Модели с полным тензором напряжений

**Модель Годунова-Роменского** По построению многофазной модели модель Годунова-Роменского получается, если положить в (2.88)  $\alpha^p = 1$  и соответственно  $\alpha^{\bar{p}} = 0$ .

**Модель Favrie [8].** Рассмотрим далее модель (2.88) и положим в уравнении (2.45)  $\bar{\omega} = 0$ . Соответственно

$$\mathbf{l}^p = \mathbf{l}^{1,p} = -\frac{\dot{\alpha}^p}{3\alpha^p} \mathbf{A}^p.$$

Отсюда получим для уравнения (2.88с):

$$\dot{\mathbf{A}}^p = -(\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{A}^p - (\alpha^p)^{-1/3} \overline{(\alpha^p)^{1/3}} \dot{\mathbf{A}}^p,$$

или

$$(\alpha^p)^{1/3} \dot{\mathbf{A}}^p + \overline{(\alpha^p)^{1/3}} \dot{\mathbf{A}}^p = -(\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot (\alpha^p)^{1/3} \mathbf{A}^p.$$

Введем фазовый тензор дисторсии  $\mathcal{A}^p$  как:

$$\mathcal{A}^p := (\alpha^p)^{1/3} \mathbf{A}^p.$$

Тогда уравнение (2.88с) может быть записано в виде:

$$\dot{\mathcal{A}}^p = -(\nabla \otimes \mathbf{u}^p) \cdot \mathcal{A}^p.$$

Данный вид тензора дисторсии и соответствующее уравнение совместности полностью совпадают со своими однофазными аналогами. Такой вид тензора и соответствующее уравнение были рассмотрены в [8].

Остальные уравнения модели [8] далее не рассматриваются, так как эта модель является равновесной по скоростям и давлениям.

## § 2.4. Заключение

В настоящем разделе рассмотрен вывод полностью неравновесной многофазной модели типа Баера-Нунциато в случае гиперупругого поведения фаз. Модель включает в себя два интерфейсных давления и две интерфейсные скорости. Интерфейсные напряжения являются полным (не шаровым) тензором второго ранга.

Показано, что известные гидродинамические (то есть с шаровым тензором напряжений) модели типа Баера-Нунциато являются частными случаями построенной. По отношению к известным авторам многофазным моделям с гиперупругим поведением фаз настоящая модель является альтернативной — все они имеют шаровой тензор интерфейсных напряжений.

Отметим, что построенные модели удовлетворяют стандартного вида законам сохранения массы, импульса и энергии для смеси. Помимо этого, уравнения для тензора дисторсии являются материально индифферентными, см. [21].

Исследование гиперболичности построенной гиперупругой модели и ее свойств, в частности, линейной вырожденности характеристических полей, соответствующих контактному разрыву решения задачи, является предметом будущей работы.

## Глава 3. Математические модели динамики многофазных сред

В настоящей главе в законченном виде рассматриваются варианты гиперупругой модели типа Годунова-Роменского и модели типа Баера-Нунциато с необходимыми уравнениями состояния, которые непосредственно используются в дальнейшей части работы. В частности, на их примере будут рассмотрены конкретные варианты предложенных в работе вычислительных алгоритмов и представлены результаты расчетов. Рассматриваемые модели являются

- основанными на эйлеровом описании среды;
- многофазными(многокомпонентными);
- гиперболическими первого порядка.

В качестве гиперупругой модели рассматривается модель Годунова-Роменского, на основе которой строится многофазная (многокомпонентная) модель с различными параметрами уравнений состояния для каждой из сред. Данная многофазная модель описывает поведение фаз(компонент) с полным тензором напряжений.

В качестве многофазной модели рассматривается модель Баера-Нунциато из работы [95]. Данная модель является «гидродинамической», поскольку для каждой из фаз рассматривается только соответствующая шаровая часть тензора напряжений. Рассматриваемая модель является полностью неравновесной и служит фундаментом для построения более сложных моделей [2, 4, 8, 67, 68].

Для введения межфазных границ в рамках рассматриваемых моделей используется метод диффузной границы. При этом ширина диффузной границы не является параметром в рассматриваемых моделях.

### § 3.1. Модель Годунова-Роменского

В настоящем разделе представлена математическая модель поведения гиперупругой среды в эйлеровой постановке.

### 3.1.1. Однородная модель

Для описания деформаций сплошной среды в эйлеровых координатах используется модель Годунова-Роменского [96], включающая в себя трехмерную систему уравнений законов сохранения импульса (3.1a) и энергии (3.1c), динамические условия совместности деформаций и скоростей (3.1b):

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \mathbf{T}) = 0, \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{F})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{F} \otimes \mathbf{u} - \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{F}^T) = 0, \quad (3.1b)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}E - \mathbf{u} \otimes \mathbf{T}) = 0. \quad (3.1c)$$

Здесь  $\rho$  — плотность среды, определяемая по формуле  $\rho = \rho_0 / \det(\mathbf{F})$ ,  $\mathbf{T}$  — тензор напряжений Коши,  $\rho_0$  — начальная плотность невозмущенной среды,  $E = \mathcal{U} + |\mathbf{u}|^2/2$  — полная энергия системы,  $\mathcal{U} = \mathcal{U}(\mathbf{F}, \mathcal{S})$  — внутренняя энергия. Неизвестные в уравнении — компоненты тензора дисторсии,  $\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{X}}\mathbf{x}$  ( $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{X}$  — эйлеровы и лагранжевы координаты среды), вектор скоростей  $\mathbf{u}$  и энтропия  $\mathcal{S}$ .

В силу динамических условий совместности скоростей и деформаций (3.1b) выполнены условия  $\nabla \cdot (\rho\mathbf{F}) = 0$  для любого момента времени, если оно выполнено для начальных условий [58]. Эти условия гарантируют непрерывность деформаций среды.

Следствием уравнений (3.1a)-(3.1b) является закон сохранения массы:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0.$$

Для замыкания системы уравнений (3.1a)-(3.1c) используется каноническое уравнение состояния для внутренней энергии. Внутренняя энергия зависит от компонент тензора дисторсии  $[\mathbf{F}]_{ij} = F_{ij}$  и энтропии  $\mathcal{S}$ . Можно показать [46,97], что для обеспечения независимости внутренней энергии от системы отсчета, она должна быть выражена через компоненты симметричного объективного тензора, который является мерой деформации и выражается через тензор дисторсии, то есть

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}(\mathbf{F}, \mathcal{S}) = \hat{\mathcal{U}}(\mathbf{G}, \mathcal{S}). \quad (3.2)$$

Таким образом, существует множество форм для канонического уравнения состояния. Ряд примеров изложен в [46,88]. В данной работе используется тензор Фингера (метрический тензор деформации), который определяется как  $\mathbf{G} = \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{F}^{-1}$ .

При использовании тензора Фингера  $\mathbf{G}$  тензор напряжений Коши записывается согласно формуле Мурнагана [46]:

$$\mathbf{T} = -2\rho\mathbf{G} \cdot \frac{\partial\mathcal{U}}{\partial\mathbf{G}}. \quad (3.3)$$



Далее, поскольку  $\mathcal{U}$  является функцией тензора Фингера  $\mathbf{G}$ , то она однозначно выражается через его инварианты  $I_{1,2,3}$ :

$$\begin{aligned}\mathcal{U} &= \mathcal{U}(I_1, I_2, I_3, \mathcal{S}), \\ I_1 &= \text{tr}(\mathbf{G}), \quad I_2 = [\text{tr}(\mathbf{G})^2 - \text{tr}(\mathbf{G}^2)]/2, \quad I_3 = \det(\mathbf{G}).\end{aligned}\tag{3.4}$$

Внутренняя энергия может быть представлена в виде суммы двух слагаемых, «гидростатического»  $\mathcal{U}^h$ , зависящего только от объемной деформации среды, и «сдвигового», описывающего энергию сдвиговой деформации  $\mathcal{U}^{\text{sh}}$  [98] и зависящего от тензора дисторсии  $\mathbf{G}$ :

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}^h(I_3, \mathcal{S}) + \mathcal{U}^{\text{sh}}(I_1, I_2, I_3, \mathcal{S}).\tag{3.5}$$

В случае малых перемещений (3.5) переходит в классический закон Гука.

В данной работе используется изотропное гиперупругое уравнение состояния из [58], для которого:

$$\mathcal{U}^h(I_3, \mathcal{S}) = \frac{K_0}{2\alpha^2} \left( I_3^{\alpha/2} - 1 \right)^2 + c_v T_0 I_3^{\gamma/2} (\exp[S/c_v] - 1),\tag{3.6}$$

$$\mathcal{U}^{\text{sh}}(I_1, I_2, I_3) = B_0 I_3^{\beta/2} (I_1^2/3 - I_2)/2.\tag{3.7}$$

Здесь  $K_0 = c_0^2 - (4/3)b_0^2$ ,  $B_0 = b_0^2$  — скорость звука и сдвиговой волны в квадрате, соответственно,  $c_v$  — теплоемкость,  $\alpha, \beta, \gamma$  — коэффициенты, описывающие нелинейное поведение среды.

Приведенная модель (3.1a)-(3.1c) является гиперболической системой уравнений 1-го порядка. С ее помощью можно описать как твердые тела (при этом  $\partial\mathcal{U}/\partial I_{1,2,3} \neq 0$ ), так и жидкость/газ ( $\partial\mathcal{U}/\partial I_{1,2} \equiv 0$ , то есть  $\mathcal{U}^{\text{sh}} \equiv 0$ ). Модель также допускает обобщения на случай пластичности — в рамках модели максвелловской релаксации напряжений [46]. В этом случае определение  $\mathbf{F}$  как тензора градиента деформаций теряет смысл, поскольку он уже не может быть выражен как градиент движения по лагранжевым переменным и является формально параметром состояния, определяемым уравнением (3.1b), которое приобретает смысл определяющего соотношения.

### 3.1.2. Кусочно-однородная модель

Под неоднородным материалом (средой) далее будем понимать материал, свойства которого зависят от лагранжевой координаты его частиц. Рассмотрим кусочно-однородную среду, занимающую объем  $\Omega$ .

Пусть  $\phi_k = \phi_k(\mathbf{X})$  — характеристические функции областей однородности  $\Omega_k$  (далее — фаз) с параметрами среды  $\mathbf{a}^{(k)}$ ,  $k = \overline{1, N_f}$ ,  $N_f$  — число фаз,  $\Omega = \bigcup_{k=1}^{N_f} \Omega_k$ ,  $\mathcal{U} = \mathcal{U}(\mathbf{G}, \mathcal{S}; \mathbf{a}^{(k)})$  в области  $\Omega_k$ . Тогда распределение свойств среды в лагранжевых

координатах задается выражением:

$$\mathbf{a}(\mathbf{X}) = \sum_{k=1}^{N_f} \mathbf{a}^{(k)} \phi_k(\mathbf{X}),$$

$$\phi_k(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{X} \in \Omega_k, \\ 0 & \mathbf{X} \notin \Omega_k, \end{cases} \quad k = \overline{1, N_f}, \quad \sum_{k=1}^{N_f} \phi_k(\mathbf{X}) = 1.$$

При движении среды функция  $\phi_k$  задается в эйлеровых координатах зависимостью  $\phi_k = \phi_k(\mathbf{x}, t)$ . Для среды, движущейся со скоростью  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ , эволюция значения  $\phi_k$  в эйлеровых координатах описывается неконсервативным уравнением переноса, дополненным соответствующим начальным условием:

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_k = 0, \quad (3.8)$$

где  $\mathbf{u}$  — поле скорости.

В данной работе используются «сглаженные» функции  $\phi_k$ . При этом ширина зоны «сглаживания» («диффузной границы») является параметром, не зависящим от шага сетки, в численных расчетах зона перехода разрешается сеткой. Уравнение (3.8) является неконсервативным и решается совместно с уравнениями модели Годунова-Роменского (3.1a)-(3.1c).

Рассмотренная модель позволяет описывать динамику неоднородной среды в случае, если фазы описываются одинаковыми уравнениями состояния с различными параметрами. При этом в зависимости от конкретного выбора параметров уравнения состояния среды могут быть как «твердыми» (гиперупругими с полным тензором напряжений), так и «жидкими» или «газообразными» (гиперупругими с шаровым тензором напряжений). Модель имеет ряд характерных свойств многофазных моделей: состоит из 2 групп уравнений (консервативная и неконсервативная) и допускает большие скачки свойств на малых пространственных масштабах. В настоящей работе эта модель рассматривается как простейшая задача для отработки алгоритмических вопросов для численного решения уравнений более сложных многофазных моделей.

### § 3.2. Модель Баера-Нунциато

В данной главе будет рассмотрена математическая модель Баера-Нунциато поведения многофазных сред [1]. Данная модель не является гиперупругой, тензоры деформаций и напряжений являются шаровыми.

Модель Баера-Нунциато с релаксационными слагаемыми впервые предложена в работе [95] для анализа процесса перехода дефлаграции в детонацию при моделировании динамики горения гранулированных взрывчатых веществ. Данная модель нашла

широкое применение в целом ряде задач, в частности, связанных с анализом интенсивных ударно-волновых процессов. Как правило, в таких случаях в модели Баера-Нунциато делается предположение о нахождении системы в термодинамическом и/или механическом равновесии (равенство температур, скоростей, давлений и химических потенциалов фаз). Такие модели являются более простыми с точки зрения их анализа, построения численных схем и дальнейших вычислительных затрат. При этом такие модели обладают меньшей степенью общности. В частности, в таких моделях, как правило, используется дополнительное (или единственное) уравнение состояния для смеси [4]. В рамках этих моделей учет различных уравнений состояния для разных фаз возможен, однако сложен для практической реализации. То же относится к использованию табличных уравнений состояния фаз.

Модель Баера-Нунциато с релаксационными слагаемыми, описывающая двухфазное течение, может быть представлена в виде системы гиперболических уравнений [95]:

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \mathbf{u}_1 \cdot \nabla \alpha_k = \nu (P_k - P_{\bar{k}}), \quad (3.9a)$$

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k) = 0, \quad (3.9b)$$

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k) + \nabla (\alpha_k P_k) - P_1 \nabla \alpha_k = \mu (\mathbf{u}_{\bar{k}} - \mathbf{u}_k), \quad (3.9c)$$

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k (\rho_k E_k + P_k) \mathbf{u}_k) - P_1 \mathbf{u}_1 \nabla \alpha_k = \mu (\mathbf{u}_{\bar{k}} - \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{u}_1 + \nu (P_{\bar{k}} - P_k) P_1. \quad (3.9d)$$

Здесь  $\alpha_k$ ,  $\rho_k$ ,  $\mathbf{u}_k$ ,  $P_k$ ,  $E_k$  — объемная доля, плотность, поле скоростей, давление и полная энергия фазы  $k = 1, 2$ , соответственно;  $\bar{k} = \{1, 2\} \setminus k$ ;  $\nu$ ,  $\mu$  — релаксационные параметры. Для объемных долей выполнено условие нормировки  $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ . Полная энергия  $k$ -ой фазы определена как  $E_k = \mathcal{U}_k + \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{u}_k / 2$ , где  $\mathcal{U}_k$  — внутренняя энергия фазы.

Уравнения модели включают в себя: уравнение для объемной доли (3.9a), законы сохранения массы (3.9b), импульса (3.9c) и энергии (3.9d).

Величины  $\mathbf{u}_1$  и  $P_1$  являются так называемыми «интерфейсными» скоростью и давлением. Для замыкания модели необходимо указать их конкретную зависимость от переменных задачи. Она может быть определена целым рядом способов, причем выбор замыкающих соотношений непосредственно влияет на структуру волн и поведение фаз в модели, см. [1, 99–101]. В настоящей работе используется вариант, предложенный в оригинальной работе [1]:

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1, \quad P_1 = P_2, \quad (3.10)$$

где  $k = 1$  соответствует менее сжимаемой фазе,  $k = 2$  — менее сжимаемой фазе.

Термодинамические свойства фаз определяются уравнениями состояния вида  $\mathcal{U}_k = \mathcal{U}_k(P_k, \rho_k)$ . Далее в работе, если не оговорено специально, рассматривается

двучленное уравнение состояния вида:

$$\mathcal{U}_k = \frac{P_k + \gamma_k P_{\infty,k}}{(\gamma_k - 1) \rho_k}, \quad (3.11)$$

где  $P_{\infty,k}$  и  $\gamma_k$  — референсное давление и показатель адиабаты. Помимо этого, в работе используется уравнение состояния Ми-Грюнайзена вида [102]:

$$\mathcal{U}_k = \frac{P_k - P_k^x(\rho_k)}{(\gamma_k - 1) \rho_k} + \mathcal{U}_k^x(\rho_k), \quad (3.12)$$

где

$$P_k^x(\rho_k) = \frac{\rho_k (c_k^0)^2}{n} \left[ \left( \frac{\rho_k}{\rho_k^0} \right)^n - 1 \right], \quad \mathcal{U}_k^x = \int_{\rho_k^0}^{\rho_k} \frac{P_k^x(\rho_k)}{\rho_k^2} d\rho_k.$$

Отметим, что система уравнений (3.9) содержит недивергентные члены вида  $P_I \nabla \alpha_k$  и не может быть записана в консервативном виде. Эта особенность характерна для целого ряда многофазных многоскоростных моделей [66].

Помимо этого, в представленной модели есть слагаемые, соответствующие релаксационным процессам. Данные слагаемые описывают жесткую («почти мгновенную») релаксацию и описывают процесс перехода фаз в состояние межфазного равновесия, которое в рассматриваемом случае характеризуется равенством давлений и скоростей.

## Глава 4. Вычислительные алгоритмы

Рассматриваемый в главе 3 класс задач описывается гиперболическими уравнениями первого порядка. При этом:

1. Размерность соответствующих систем уравнений достаточно велика (гиперболическая система уравнений гиперупругости (раздел 3.1) включает в себя 14 уравнений, многофазная модель Баера-Нунциато (раздел 3.2) включает в себя 12 уравнений);
2. Решения соответствующих систем имеют богатую структуру разрывов (помимо «стандартных», газодинамических — еще и сдвиговые волны в случае модели из раздела 3.1);
3. Система уравнений включает в себя как консервативные, так и неконсервативные уравнения в случае модели из раздела 3.2;
4. Система уравнений содержит слагаемые, описывающие жесткую релаксацию в случае модели из раздела 3.2; релаксация описывает приведение модели к состоянию межфазного равновесия (термодинамического и механического).

По этой причине к комплексу вычислительных алгоритмов могут быть сформулированы следующие требования:

- возможность проведения расчетов с «высоким» порядком (с минимально приемлемой численной диссипацией на разрывах);
- возможность аппроксимировать как дивергентные, так и недивергентные операторы;
- эти возможности должны быть обеспечены в рамках единого теоретического (а в идеальном случае — и программного) подхода.

Распространенными в настоящее время способами построения схем высокого порядка аппроксимации являются классы методов WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory; библиография, посвященная этому методу, огромна, опорными работами являются [103, 104], для решения задач гиперупругости в гиперболических постановках, см., например, [58, 60]) и разрывный метод Галеркина с применением метода Рунге-Кутты (RK/DG, Rung-Kutta/Discontinuous Galerkin, см. опорные работы [105–107]). В настоящей работе используются схемы второго типа. Такой выбор обусловлен тем, что в

контексте разрывного метода Галеркина возможно построение эффективных схем как для гиперболических систем уравнений первого порядка, так и, при необходимости, для уравнений высокого порядка. Соответствующая разновидность разрывного метода Галеркина в литературе носит название «локального разрывного метода Галеркина» (LDG, Local Discontinuous Galerkin, см. [108] и ссылки там). В силу того, что математические модели для целого ряда многофазных задач включают в себя уравнения в частных производных высокого (выше второго) порядка, использование теоретической базы разрывного метода Галеркина является перспективным.

Опишем теперь особенности применения разрывного метода Галеркина для решения системы гиперболических уравнений с неконсервативными слагаемыми, которую запишем для области  $\Omega = [0, L]$  в виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{Q}) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0, \quad (4.1)$$

где  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(x, t) = [q_1, \dots, q_n]$ ,  $\mathbf{A}(x, \mathbf{Q}) \neq \partial \mathcal{F} / \partial \mathbf{Q}$  для какого-либо  $\mathcal{F}$ . Обобщенное решение данной задачи для консервативных систем (в случае, когда  $\mathbf{A}(\mathbf{Q}) = \partial \mathcal{F} / \partial \mathbf{Q}$ ) ищется в классе обобщенных функций. Для неконсервативных систем (в случае, когда  $\mathbf{A}(x, \mathbf{Q}) \neq \partial \mathcal{F} / \partial \mathbf{Q}$ ) 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 существуют разные подходы:

- Теория Dal Maso, Lefloch, Murat (DLM), в рамках которой решение разделяется на области непрерывности и области разрывов. Обобщенное произведение определено в областях непрерывности. В областях разрывов обобщенное произведение рассматривается как предел непрерывного пути, соединяющего значения с обеих сторон разрыва.
- Определение обобщенного произведения, основанного на теории обобщенных функций Colombeau [109, 110].
- Определение обобщенного решения как предела нулевой вязкости возмущенной параболической задачи, которое ведет к интегрированию неконсервативного произведения вдоль вязкого профиля. Данный подход ведет к рассмотрению кривых Alouges-Merlet [111]. Данный подход был использован в работе [112] для создания численных схем и вычислительных алгоритмов.

В настоящей работе используется распространенный подход, основанный на применении теории DLM (Dal Maso–Le Floch–Murat, [113]).

## § 4.1. Разрывный метод Галёркина

Вопросы теоретического обоснования и применения разрывного метода Галеркина широко описаны в современной литературе. По этой причине в настоящем разделе приводится лишь краткое описание разрывного метода Галеркина. Общая схема вычислительного алгоритма включает следующие компоненты:

1. Пространственная дискретизация уравнений модели с помощью разрывного метода Галеркина (DG).
2. Решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений с помощью метода Рунге-Кутты (RK).
3. Введение искусственной диссипации для монотонизации полученного решения.
4. Расчет релаксационных слагаемых.

### 4.1.1. Разрывный метод Галеркина

#### для неконсервативной системы гиперболических уравнений

Рассмотрим неоднородную нелинейную гиперболическую систему уравнений, записанную в декартовой прямоугольной системе координат:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \mathcal{F}_k}{\partial x_k} + \sum_{k=1}^3 \mathbf{B}_k(\mathbf{Q}) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x_k} = \mathbf{S}(\mathbf{Q}), \quad (4.2)$$

где  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega = [0, L_1] \times [0, L_2] \times [0, L_3] \subset \mathbb{R}^3$ ,  $t \in [0, T] \subset \mathbb{R}^+$ ,  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) = (Q_1, \dots, Q_M) \in \Omega_q \subset \mathbb{R}^M$  — вектор первичных переменных,  $M$  — общее число компонент вектора  $\mathbf{Q}$ ,  $\Omega_q$  — фазовое пространство вектора  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathcal{F}_k$  — вектор плотности потока,  $\mathbf{B}_k$  — матрица, отвечающая квазилинейной части системы уравнений,  $\mathbf{B}_k \neq \partial \mathcal{G}(\mathbf{Q})_k / \partial \mathbf{Q}$ , где  $\mathcal{G}(\mathbf{Q})$  — какая-либо функция,  $\mathbf{S}$  — источники, описывающие релаксацию. Уравнение (4.2) может быть записано как квазилинейное вида:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \mathcal{A}_k(\mathbf{Q}) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x_k} = \mathbf{S}(\mathbf{Q}), \quad (4.3)$$

где  $\mathcal{A}_k = \mathbf{B}_k + \partial \mathcal{F}_k / \partial \mathbf{Q}$ .

Введем в области  $\Omega$  декартову ортогональную сетку — разбиение на ячейки  $\{\omega_{ijk}\}$  — и обозначим ячейку сетки (конечный элемент)  $\omega_{ijk} = [x_{1,i}, x_{1,i+1}] \times [x_{2,j}, x_{2,j+1}] \times [x_{3,k}, x_{3,k+1}]$ , где  $x_{1,i} = i\Delta x_1$  ( $0 \leq i \leq N_1$ ),  $x_{2,j} = j\Delta x_2$  ( $0 \leq j \leq N_2$ ),  $x_{3,k} = k\Delta x_3$  ( $0 \leq k \leq N_3$ ). Пусть индекс  $\alpha$  упорядочивает индексы  $i, j$  и  $k$ . Обозначим через  $\mathcal{V}_h^p(\Omega)$  пространство элементов из  $\mathcal{L}^1(\Omega)$  с проекциями на ячейки  $\omega_\alpha$ , которые принадлежат векторному пространству  $\mathcal{P}^p(\omega_\alpha)$  полиномов степени  $p$ :

$$\mathcal{V}_h^p = \{v \in \mathcal{L}^1(\Omega) : v|_{\omega_\alpha} \in \mathcal{P}^p(\omega_\alpha); 1 \leq \alpha \leq N\},$$

где  $N = N_1 \times N_2 \times N_3$ ,  $N_k$  — число ячеек вдоль оси  $x_k$ .

Представим решение  $\mathbf{Q}(\mathbf{x}, t)$  в ячейке  $\omega_\alpha$  конечномерной аппроксимацией  $\mathbf{Q}_h \in \mathcal{V}_h^p$ :

$$\mathbf{Q}_h(\mathbf{x}, t)|_{\omega_\alpha} = \sum_{l=0}^p \psi_\alpha^{(l)}(\mathbf{x}) \mathbf{Q}_\alpha^{(l)}(t), \quad (4.4)$$

где  $\psi_\alpha^{(l)}$  — полином Лежандра степени  $l$ . Для получения полудискретной системы уравнений относительно приближенного решения  $\mathbf{Q}_h(\mathbf{x}, t)$  подставим (4.4) в (4.2), умножим (4.2) на компоненту  $v_h^k \in \mathcal{V}_h^l$ ,  $l = \overline{1, M}$  вектора пробных функций  $\mathbf{V}_h$  и проинтегрируем по области  $\omega_\alpha$ :

$$\begin{aligned} \int_{\omega_\alpha} \frac{\partial \mathbf{Q}_h}{\partial t} v_h^l(\mathbf{x}) \, d\Omega + \sum_{k=1}^3 \int_{\omega_\alpha} \frac{\partial \mathcal{F}_k}{\partial x_k} v_h^l(\mathbf{x}) \, d\Omega + \sum_{k=1}^3 \left\langle \left[ \mathcal{B}_k(\mathbf{Q}_h) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}_h}{\partial x_k} \right]_\Psi, v_h^l(\mathbf{x}) \right\rangle = \\ = \int_{\omega_\alpha} \mathcal{S}(\mathbf{Q}_h) v_h^l(\mathbf{x}) \, d\Omega, \quad l = \overline{1, p}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Третье слагаемое в (4.5) содержит неконсервативное произведение  $\left[ \mathcal{B}_k(\mathbf{Q}_h) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}_h}{\partial x_k} \right]_\Psi$ . Для определения обобщенного решения (4.5) в случае неконсервативных систем ( $\mathcal{B}_k \neq 0$ ) в настоящей работе используется, как отмечалось выше, распространенный подход, основанный на применении теории DLM. В рамках этого подхода для корректного определения «неконсервативного произведения» (non-conservative product) вводится липшицево отображение (путь)  $\Psi : [0, 1] \times \Omega_q \times \Omega_q \mapsto \Omega_q$ , которое «соединяет» значения решения по разные стороны от разрыва в точке  $\mathbf{x}_d$  по направлению  $\mathbf{n}$  (внешняя единичная нормаль к поверхности  $\partial\omega_\alpha$ ) и обладает следующими свойствами:

1.  $\Psi(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}; 0) = \mathbf{Q}^-$ ,  $\Psi(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}; 1) = \mathbf{Q}^+$ ,  $\mathbf{Q}^\pm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbf{Q}(\mathbf{x}_d \pm \varepsilon \mathbf{n})$ .
2.  $\Psi(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}, \mathbf{n}; s) = \mathbf{Q}$ ,
3. Для любого ограниченного множества  $\mathcal{O} \subset \Omega_q$  существует константа  $k$  такая, что

$$\left| \frac{\partial \Psi}{\partial s}(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}; s) \right| \leq k \left| \mathbf{Q}^+ - \mathbf{Q}^- \right|$$

для любых  $\mathbf{Q}^+, \mathbf{Q}^- \in \mathcal{O}$  и  $s \in [0, 1]$ .

4. Для любого ограниченного множества  $\mathcal{O} \subset \Omega_q$  существует константа  $K$  такая, что

$$\left| \frac{\partial \Psi}{\partial s}(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}; s) - \frac{\partial \Psi}{\partial s}(\mathbf{W}^-, \mathbf{W}^+, \mathbf{n}; s) \right| \leq K \left| (\mathbf{Q}^+ - \mathbf{W}^+) + (\mathbf{Q}^- - \mathbf{W}^-) \right|$$

для любых  $\mathbf{Q}^+, \mathbf{Q}^-, \mathbf{W}^+, \mathbf{W}^- \in \mathcal{O}$  и  $s \in [0, 1]$ .

После введения пути слагаемое  $\left[ \mathcal{B}_k(\mathbf{Q}_h) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}_h}{\partial x_k} \right]_\Psi$  может быть определено в обобщенном смысле следующим образом [113]:



$$\begin{aligned} \left\langle \left[ \mathbf{B}_k(\mathbf{Q}_h) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}_h}{\partial x_k} \right]_{\Psi}, v_h^l(\mathbf{x}) \right\rangle &\stackrel{\text{def}}{=} \int_{\omega_{\alpha}^0} \mathbf{B}_k(\mathbf{Q}_h) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}_h}{\partial x_k} v_h^l(\mathbf{x}) \, d\Omega + \\ &+ \int_{\partial \omega_{\alpha}} \left( \int_0^1 \mathbf{B}_k(\Psi(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}; s)) \frac{\partial \Psi(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}; s)}{\partial s} \, ds \right) v_h^l(\mathbf{x}) \, d\sigma, \quad l = \overline{1, p}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

где  $\omega_{\alpha}^0 = \omega_{\alpha} \setminus \partial \omega_{\alpha}$ . Заметим, что данное определение существенно зависит от выбранного пути  $\Psi$ . В дальнейшем для простоты можно считать, что он выбран линейным, то есть  $\Psi(\mathbf{Q}^-, \mathbf{Q}^+, \mathbf{n}; s) = \mathbf{Q}^- + s(\mathbf{Q}^+ - \mathbf{Q}^-)$ .

Постановка задачи Римана для соответствующей неконсервативной системы представлена в [114]. На основе сделанных выше построений могут быть выведены соответствующие схемы типа Годунова. В частности, численная схема для разрывного метода Галеркина для уравнения (4.5) может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \int_{\omega_{\alpha}} \frac{\partial \mathbf{Q}_h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} v_h^l(\mathbf{x}) \, d\Omega - \sum_k \int_{\omega_{\alpha}} \mathcal{F}_k \frac{\partial v_h^l(\mathbf{x})}{\partial x_k} \, d\Omega + \sum_k \int_{\omega_{\alpha}^0} \mathbf{B}_k(\mathbf{Q}_h) \cdot \frac{\partial \mathbf{Q}_h}{\partial x_k} v_h^l(\mathbf{x}) \, d\Omega + \\ + \int_{\partial \omega_{\alpha}} v_h^l(\mathbf{x}) \mathcal{D} \mathbf{n} \, d\sigma = \int_{\omega_{\alpha}} \mathcal{S}(\mathbf{Q}_h) v_h^l(\mathbf{x}) \, d\Omega, \quad l = \overline{1, p}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

где  $\mathcal{D}$  — численный неконсервативный поток. В настоящей работе используются следующие варианты численных потоков:

- Поток Лакса-Фридрикса:

$$\mathcal{D} \mathbf{n} = \left( \frac{1}{2} \int_0^1 (\mathcal{A}(\mathbf{Q}_{\text{in}} \pm s(\mathbf{Q}_{\text{out}} - \mathbf{Q}_{\text{in}}))) \, ds \pm \mathbb{I} \frac{\Delta x}{\Delta t} \right) (\mathbf{Q}_{\text{out}} - \mathbf{Q}_{\text{in}}); \quad (4.8)$$

- Поток Русанова:

$$\mathcal{D} \mathbf{n} = \left( \frac{1}{2} \int_0^1 (\mathcal{A}(\mathbf{Q}_{\text{in}} \pm s(\mathbf{Q}_{\text{out}} - \mathbf{Q}_{\text{in}}))) \, ds \pm \mathbb{I} \max(|\lambda|) \right) (\mathbf{Q}_{\text{out}} - \mathbf{Q}_{\text{in}}), \quad (4.9)$$

где  $\max(|\lambda|)$  — максимальное по модулю собственное значение матрицы  $\mathcal{A}(\mathbf{Q}_{\text{in}} \pm s(\mathbf{Q}_{\text{out}} - \mathbf{Q}_{\text{in}}))$ ;

- Поток HLLEM [115]:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} \mathbf{n} = \frac{s_{\text{out}} \mathcal{F}(\mathbf{Q}_{\text{in}}) - s_{\text{in}} \mathcal{F}(\mathbf{Q}_{\text{out}})}{s_{\text{out}} - s_{\text{in}}} \mathbf{n} + \kappa \frac{s_{\text{out}} s_{\text{in}}}{s_{\text{out}} - s_{\text{in}}} (\mathbf{Q}_{\text{out}} - \mathbf{Q}_{\text{in}}) - \\ - \kappa \frac{s_{\text{in}}}{s_{\text{in}} - s_{\text{out}}} \left[ \tilde{B}(\mathbf{Q}_{\text{out}}, \mathbf{Q}_*) (\mathbf{Q}_* - \mathbf{Q}_{\text{out}}) + \tilde{B}(\mathbf{Q}_*, \mathbf{Q}_{\text{in}}) (\mathbf{Q}_{\text{in}} - \mathbf{Q}_*) \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

где  $\kappa = \sum_{k=1}^3 n_k$ ,  $Q_{\text{in}} \in \omega_\alpha$ ,  $Q_{\text{out}} \in \omega_\beta$ , где  $\omega_\beta$  – смежная ячейка к  $\omega_\alpha$ , скорость распространения волн в задаче Римана оценивается следующим образом:

$$\begin{cases} s^{\text{in(out)}} = \min(\max) \left( 0, \Lambda(Q_{\text{in(out)}}), \Lambda(\hat{Q}) \right), & \text{если } \kappa > 0, \\ s^{\text{in(out)}} = \max(\min) \left( 0, \Lambda(Q_{\text{in(out)}}), \Lambda(\hat{Q}) \right), & \text{иначе,} \end{cases} \quad (4.11)$$

где промежуточное состояние  $Q_*$  определяется как среднее арифметическое  $\hat{Q} = (Q_{\text{in}} + Q_{\text{out}}) / 2$ .

Рассматривая произвольное  $v_h(x) \in \text{span} \{ \psi_\alpha^{(l)} \}$ , получаем следующую полудискретную систему уравнений относительно переменных  $\{ Q_\alpha^{(l)} \}$ , определенных в (4.4):

$$\mathbf{M} \frac{d\tilde{Q}_\alpha}{dt} = \mathbf{H}(\tilde{Q}_\alpha) + \mathbf{I}(\tilde{Q}_\alpha). \quad (4.12)$$

Здесь  $\tilde{Q}_\alpha = (Q_{0,\alpha}^{(0)}, \dots, Q_{0,\alpha}^{(k)}, Q_{1,\alpha}^{(0)}, \dots, Q_{M,\alpha}^{(0)}, \dots, Q_{M,\alpha}^{(k)})$  – вектор неизвестных. Его компоненты  $Q_{m,\alpha}^{(l)}$  в дальнейшем будем называть  $l$ -ой гармоникой ( $l = 0, \dots, k$ )  $m$ -ой компоненты вектора  $Q_\alpha$ . Матрица  $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times (k+1)}$  является матрицей Грама с компонентами

$$[\mathbf{M}]_{ml} = \int_{\omega_\alpha} \psi_\alpha^{(l)} \psi_\alpha^{(m)} dx,$$

вектор  $\mathbf{H}(\tilde{Q}_\alpha)$  является аппроксимацией дифференциального оператора в левой части системы уравнений (4.2), вектор  $\mathbf{I}(\tilde{Q}_\alpha)$  соответствует аппроксимации правой части (4.2),

$$I_m^{(l)} = \int_{\omega_i} S_m(Q_h) \psi_\alpha^{(l)} dx. \quad (4.13)$$

#### 4.1.2. Алгоритм расщепления

Одна из наиболее простых стратегий решения системы (4.12) – расщепление по процессам первого порядка. Разобьем временной интервал на части точками  $\{t^n\}$ . Далее на каждом временном шаге  $t \in [t^n, t^{n+1}]$  сначала решается задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\mathbf{M} \frac{d\tilde{Q}_\alpha}{dt} = \mathbf{H}(\tilde{Q}_\alpha), \quad t \in (t^n, t^{n+1}], \quad (4.14)$$

с начальными данными  $\tilde{Q}_\alpha^0 = \tilde{Q}_\alpha(t^n)$  для определения «промежуточного» решения  $\tilde{Q}_{\alpha,\text{H}} = \tilde{Q}_\alpha(t^{n+1})$ . Затем решается задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\mathbf{M} \frac{d\tilde{Q}_\alpha}{dt} = \mathbf{I}(\tilde{Q}_\alpha), \quad t \in (t^n, t^{n+1}] \quad (4.15)$$

с начальными данными  $\tilde{\mathbf{Q}}_{\alpha, \text{H}}$ . Решение системы (4.15) при  $t = t^{n+1}$  считается решением системы (4.12) в момент времени  $t = t^{n+1}$ .

Для интегрирования по времени однородной системы (4.14) далее используется вариант метода Рунге-Кутты TVD/RK3 [105] с лимитированием консервативных переменных на каждом шаге метода. Подробнее подход к процедуре лимитирования описан далее в разделе 4.2. Для интегрирования по пространству используется метод квадратур Гаусса-Лежандра.

Для интегрирования системы уравнений (4.15) используется неявный метод ФДН с автоматическим выбором шага интегрирования, описанный в разделе 4.1.4.

### 4.1.3. Алгоритм интегрирования однородной гиперболической системы уравнений

Для интегрирования по времени системы обыкновенных дифференциальных уравнений (4.14) используется TVD/RK3 метод Рунге-Кутты, представленный ниже. Для данного метода Рунге-Кутты численное решение не будет монотонным для случая разрывных решений. Традиционный способ обеспечить монотонность решения заключается в добавлении в схему численной диссипации. Более подробно алгоритм лимитирования представлен в разделе 4.2 настоящей работы. В общем виде операция лимитирования может быть представлена как операторное соотношение вида:

$$\overline{\tilde{\mathbf{Q}}_{\alpha}} := \tilde{\Lambda} \tilde{\mathbf{Q}}_{\alpha}, \quad (4.16)$$

где  $\tilde{\Lambda}$  — оператор лимитирования.

Тогда общая схема интегрирования по времени с помощью метода TVD/RK3 и лимитирования на каждой стадии имеет вид [106]

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{Q}}_i^1 &= \tilde{\mathbf{Q}}_i^n + \Delta t \mathbf{P} \left( \tilde{\mathbf{Q}}_i^n \right), & \overline{\tilde{\mathbf{Q}}_i^1} &= \tilde{\Lambda} \tilde{\mathbf{Q}}_i^1, \\ \tilde{\mathbf{Q}}_i^2 &= \frac{3}{4} \tilde{\mathbf{Q}}_i^n + \frac{1}{4} \tilde{\mathbf{Q}}_i^1 + \frac{1}{4} \Delta t \mathbf{P} \left( \overline{\tilde{\mathbf{Q}}_i^1} \right), & \overline{\tilde{\mathbf{Q}}_i^2} &= \tilde{\Lambda} \tilde{\mathbf{Q}}_i^2, \\ \tilde{\mathbf{Q}}_i^{n+1} &= \frac{1}{3} \tilde{\mathbf{Q}}_i^n + \frac{2}{3} \tilde{\mathbf{Q}}_i^2 + \frac{2}{3} \Delta t \mathbf{P} \left( \overline{\tilde{\mathbf{Q}}_i^2} \right), & \overline{\tilde{\mathbf{Q}}_i^{n+1}} &= \tilde{\Lambda} \tilde{\mathbf{Q}}_i^{n+1}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

где  $\mathbf{P} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{H}$ , см. (4.12).

### 4.1.4. Алгоритм расчета релаксационных слагаемых

Задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (4.15) решается неявным многошаговым методом ФДН [116] на временном интервале  $t \in (t^n, t^{n+1})$ . Разобьем временной интервал на части точками  $(t_0^n, t_1^n, \dots, t_{M-1}^n)$ , где  $t_{j+1}^n = t_j^n + \tau_j$ ,  $t_0^n = t_n$ ,  $t_{M-1}^n = t_{n+1}$ . Таким образом  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  — шаг интегрирования газодинамической части задачи, а  $\tau_j$  — шаг интегрирования релаксационной части.

Разностная схема решения задачи Коши для (4.15) имеет следующий вид:

$$\tilde{Q}_\alpha^0 = \tilde{Q}_\alpha(t^n); \quad \sum_{p=0}^k \zeta_p \tilde{Q}_\alpha^{j+1-p} = \tau_j \beta_0 \mathbf{R} \left( \tilde{Q}_\alpha^{j+1} \right), \quad j = 0, 1, \dots \quad (4.18)$$

Здесь  $\tau_j = \text{const}$ ,  $\mathbf{R} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{I}$ . Аппроксимации релаксационных членов  $\mathbf{I}$ , определенных в (4.13), рассчитываются численно методом квадратур Гаусса-Лежандра.

$k$	$\beta$	$\zeta_0$	$\zeta_1$	$\zeta_2$	$\zeta_3$	$\zeta_4$	$\zeta_5$	$\zeta_6$
1	1	1	-1					
2	2/3	1	-4/3	1/3				
3	6/11	1	-18/11	9/11	-2/11			
4	12/25	1	-48/25	36/25	-16/25	3/25		
5	60/137	1	-300/137	300/137	-200/137	75/137	-12/137	
6	60/147	1	-360/147	450/147	-400/147	225/147	-72/147	10/147

Таблица 4.1. Коэффициенты ФДН метода до 6-го порядка.

В дальнейшем все численные расчеты проводятся ФДН методом 6-го порядка ( $k = 6$ ). Коэффициенты метода представлены в Таблице (4.1). Для начала счета требуется знать значения  $\tilde{Q}_\alpha^j$ ,  $j = 1, \dots, k - 1$ . Для этого рекуррентно используется ФДН метод порядка  $k$ , т.е. сначала для нахождения  $\tilde{Q}_\alpha^1$  используется ФДН метод первого порядка ( $k=1$ ), затем второго ( $k = 2$ ) для  $\tilde{Q}_\alpha^2$  и т.д.

Нелинейная система уравнений (4.18) решается численно методом Ньютона:

$$\partial \mathbf{F} \left( \tilde{Q}_\alpha^{j+1} \right) / \partial \tilde{Q}_\alpha^{j+1} \Big|_{\tilde{Q}_\alpha^{j+1,s}} \cdot \left( \tilde{Q}_\alpha^{j+1,s+1} - \tilde{Q}_\alpha^{j+1,s} \right) = -\mathbf{F} \left( \tilde{Q}_\alpha^{j+1,s} \right), \quad (4.19)$$

где индекс  $s$  обозначает номер итерации,  $\tilde{Q}_\alpha^{j+1,0} = \tilde{Q}_\alpha^j$  соответствует  $s = 0$ . Функция  $\mathbf{F}$  имеет следующий вид:

$$\mathbf{F} \left( \tilde{Q}_\alpha^{j+1} \right) = \zeta_0 \tilde{Q}_\alpha^{j+1} - \tau_j \beta_0 \mathbf{R} \left( \tilde{Q}_\alpha^{j+1} \right) - \sum_{p=1}^k \zeta_p \tilde{Q}_\alpha^{j+1-p}. \quad (4.20)$$

Матрица Якоби  $\partial \mathbf{F} \left( \tilde{Q}_\alpha^{j+1} \right) / \partial \tilde{Q}_\alpha^{j+1}$  в (4.19) вычисляется с применением численного дифференцирования или аналитически (для каждого численного расчета указывается отдельно). Итерации метода Ньютона продолжаются до тех пор, пока величина  $r = \max_m |r_m|$  не станет меньше заданного значения. Здесь  $r_m$  определены как:

$$r_m = \begin{cases} \frac{\tilde{Q}_{\alpha,m}^{j+1,s+1} - \tilde{Q}_{\alpha,m}^{j+1,s}}{\tilde{Q}_{\alpha,m}^{j+1,s+1}}, & \text{если } \left| \tilde{Q}_{\alpha,m}^{j+1,s+1} \right| > 1 \\ \tilde{Q}_{\alpha,m}^{j+1,s+1} - \tilde{Q}_{\alpha,m}^{j+1,s}, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (4.21)$$

Шаг  $\tau_j$  может быть переменным. В реализованном алгоритме предусмотрен автоматический выбор шага интегрирования. В начальный момент  $\tau_0 = \Delta t/6$ . В случае, если

превышено максимальное число  $N_{\max}$  ньютоновских итераций (далее  $N_{\max} = 10$ ) или, если решение сходится к нефизичным результатам (отрицательное давление или объемная доля и т.д.), то шаг интегрирования уменьшается. В случае, когда число итераций меньше минимального значения  $N_{\min}$  (далее  $N_{\min} = 3$ ), шаг интегрирования увеличивается. При этом, если шаг интегрирования меняется, то необходимо вернуться к первому шагу метода ФДН ( $k = 1$ ) и рекурсивно пересчитать значения  $\tilde{Q}_\alpha^j, j = 1, \dots, k - 1$  для нового временного шага  $\tau$ .

Коэффициенты релаксации  $\mu$  и  $\nu$  в (4.15) либо задаются постоянными, либо рассчитываются в каждой точке пространства динамически таким образом, чтобы фазовые давления и скорости релаксировали за один газодинамический временной шаг  $\Delta t$ .

Соответствующая оценка строится следующим образом. Релаксация давлений и скоростей в случае межфазных соотношений (3.10) и УрС (3.11) может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)}{dt} &= -\mu(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \left( \frac{1}{\alpha_1 \rho_1} + \frac{1}{\alpha_2 \rho_2} \right), \\ \frac{d(P_1 - P_2)}{dt} &= -\nu(P_1 - P_2) \left[ \frac{P_1 + C_{1a}P_1 + C_{1b}}{\alpha_1 C_{1a}} + \frac{P_1 + C_{2a}P_1 + C_{2b}}{\alpha_2 C_{2a}} \right], \end{aligned} \quad (4.22)$$

где  $C_{ka} = 1/(\gamma_k - 1)$ ,  $C_{kb} = \gamma_k P_{\infty,k}/(\gamma_k - 1)$ . Здесь также предполагается, что релаксация скоростей не влияет на релаксацию давлений. Другими словами в (4.22) фиксировано давление. Тогда коэффициенты релаксации можно оценить следующим образом:

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{\Delta t} \left[ \frac{1}{\alpha_1 \rho_1} + \frac{1}{\alpha_2 \rho_2} \right]^{-1}, \\ \nu &= \frac{1}{\Delta t} \left[ \frac{P_1 + C_{1a}P_1 + C_{1b}}{\alpha_1 C_{1a}} + \frac{P_1 + C_{2a}P_1 + C_{2b}}{\alpha_2 C_{2a}} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Такой выбор значений  $\mu$  и  $\nu$  обеспечивает релаксацию за один временной шаг  $\Delta t$ .

## § 4.2. Применение ограничителей в разрывном методе Галеркина

Для указанного метода Рунге-Кутты TVD/RK3 (4.17) численное решение не будет монотонным для случая разрывных решений. Традиционный способ обеспечить монотонность решения заключается в добавлении в схему численной диссипации. Искусственная диссипация может быть введена в аппроксимации разрывного метода Галеркина различными способами, среди которых известны методы на основе геометрических ограничителей (лимитеров), явного введения дополнительных диссипативных слагаемых, алгоритмов на основе фильтрации высокочастотных компонент решения и другие [117]. В работах [118, 119] описан способ монотонизации разрывного метода Галеркина путем явного введения в схему искусственной вязкости типа Неймана-Рихтмайера. В работе [120] описан один из наиболее популярных лимитеров, построенных на использовании функции  $\min\text{mod}$ . Помимо этого, существуют лимитеры, основанные на после-

довательном ограничении степеней свободы начиная с высшей (например, моментный лимитер Криводоновой) [121].

В настоящей работе в качестве составных частей полного алгоритма лимитирования применяется три вида лимитеров:

1. лимитер Криводоновой, описанный далее в разделе 4.2.2;
2. лимитер WENO-S, описанный далее в разделе 4.2.3;
3. лимитер, обеспечивающий положительность объемных долей (и плотностей), описанный далее в разделе 4.2.4;

Для представленных выше математических моделей используются несколько алгоритмов лимитирования решения в соответствии с конкретной постановкой:

1. лимитер Криводоновой из раздела 4.2.2 для модели Годунова-Роменского и задачи однородной гиперупругости из раздела 3.1.1;
2. совместное использование лимитера Криводоновой из раздела 4.2.2 с лимитером для «концентраций»  $\phi_k$ , о которых известно, что их значения лежат на отрезке от 0 до 1, из [122], сохраняющий минимальные и максимальные значения решения, из раздела 4.2.4. Данный алгоритм лимитирования применяется для тестов с неоднородностью в задачах гиперупругости в рамках модели из раздела 3.1.2;
3. лимитер на основе реконструкции решения в ячейке на основании решения в соседних ячейках (лимитер WENO-S) из раздела 4.2.3 для задачи расчета динамики двухфазной среды в рамках модели Баера-Нунциато из раздела 3.2 для «немногоматериальных» тестов (объемные доли фаз не являются близкими к нулю).
4. комплексное лимитирование, отдельно описанное в разделе 4.2.5 на основе лимитера WENO-S из раздела 4.2.3 совместно с лимитером, обеспечивающим нахождение решения в некотором диапазоне значений из раздела 4.2.4, а также дальнейшее лимитирование решения при наличии отрицательных давлений и внутренних энергий фаз, описанное в 4.2.5. Данный подход применяется для многоматериальных задач в рамках модели Баера-Нунциато, когда объемные доли фаз являются близкими к нулю (наличие «чистых» фаз).

Процедура лимитирования может быть представлена в виде оператора

$$Q^{\text{new}} = \Lambda Q,$$

где  $Q$  — вектор неизвестных до лимитирования,  $Q^{\text{new}}$  — вектор неизвестных после лимитирования,  $\Lambda$  — один из представленных выше вариантов лимитирования. В дальнейшем для удобства изложения будут рассмотрены одномерные операторы лимитирования, которые будем обозначать как  $\Lambda_{x,y,z}$ . При этом во всех случаях

1. перед операцией лимитирования используется индикатор немонотонности, определяющий ячейки вычислительной сетки, в которых решение подлежит лимитированию;
2. лимитирование применяется для консервативных переменных;
3. в многомерных задачах представленные одномерные лимитеры  $\Lambda_k$ ,  $k = x, y, z$ , применяются последовательно вдоль каждого из направлений:

$$Q^{\text{new}} = \Lambda_z \Lambda_y \Lambda_x Q.$$

Подчеркнем, что одной из существенных особенностей предложенных подходов к монотонизации решения является стратегия лимитирования непосредственно консервативных переменных системы, что существенно уменьшает вычислительные затраты на монотонизацию решения.

#### 4.2.1. Индикатор немонотонности

Применение лимитеров является вычислительно затратной операцией, которая может понижать порядок аппроксимации решения. Помимо этого, лимитер необходим только при наличии немонотонностей на разрывах решения. При этом в случае гладких решений лимитер не нужен. Для решения этой проблемы перед лимитированием решения вводится индикатор немонотонности, определяющий необходимость лимитирования решения в данной ячейке.

Существует большое количество индикаторов немонотонности: индикатор Хартена [123], при котором приближенное решение реконструируется на подсеточном уровне, индикатор KXRCF [124], а также индикатор, основанный на функции  $\min\text{mod}$  [106]. В настоящей работе используется последний вариант, поскольку он является наиболее простым и универсальным, хотя и не самым эффективным.

Опишем данный индикатор немонотонности для одномерного случая. В многомерном случае для декартовых сеток индикатор применяется отдельно по каждому из направлений. В соответствии с введенным выше определением, рассмотрим компоненты вектора  $Q_{m,\alpha}^{(l)}$  в ячейке  $\omega_\alpha$  и зафиксируем какую-либо компоненту решения  $m$ . Обозначим полученный набор значений как  $Q_\alpha^{(l)}$ . Обозначим конечномерную аппроксимацию компоненты решения в соответствии с (4.4) как:

$$Q_h(x, t) |_{\omega_\alpha} = \sum_{l=0}^p \psi_\alpha^{(l)}(x) Q_\alpha^{(l)}(t), \quad (4.24)$$

Обозначим среднее значение решения в ячейке  $\omega_\alpha$  как:

$$\bar{Q}_\alpha = \frac{1}{h_\alpha} \int_{\omega_\alpha} Q_h(x, t) |_{\omega_\alpha} dx. \quad (4.25)$$

Скачки на границе ячейки  $\omega_\alpha$  обозначим как

$$\begin{aligned}\Delta Q_{\alpha+1/2} &= Q_{\alpha+1/2}^- - \bar{Q}_\alpha, \\ \Delta Q_{\alpha-1/2} &= \bar{Q}_\alpha - Q_{\alpha-1/2}^+.\end{aligned}$$

В каждой ячейке рассмотрим величины:

$$\tilde{Q}_\alpha^{(\text{mod})} = \text{minmod}(\Delta Q_{\alpha+1/2}, \bar{Q}_{\alpha+1} - \bar{Q}_\alpha, \bar{Q}_\alpha - \bar{Q}_{\alpha-1}), \quad (4.26a)$$

$$\tilde{Q}_\alpha^{(\text{mod})} = \text{minmod}(\Delta Q_{\alpha-1/2}, \bar{Q}_{\alpha+1} - \bar{Q}_\alpha, \bar{Q}_\alpha - \bar{Q}_{\alpha-1}), \quad (4.26b)$$

где

$$\text{minmod}(a_1, \dots, a_N) = \begin{cases} s \min(a_1, \dots, a_N), & \text{если } s = \text{sign}(a_1) = \dots = \text{sign}(a_N) \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (4.27)$$

Решение в ячейке  $\omega_\alpha$  подлежит лимитированию, если (4.27) возвращает не первый аргумент. Далее опишем процесс построения решения в ячейке, если оно подлежит лимитированию.

#### 4.2.2. Лимитер Криводоновой

Данный лимитер описан в работе [121]. Подробно в настоящей работе алгоритм не приводится. Кратко опишем суть данного лимитера.

Алгоритм лимитирования состоит из нескольких шагов. В проблемных ячейках решение ограничивается, начиная со старшей степени свободы. Решение об ограничении степени свободы принимается на основании сравнения степени свободы со скачком решения в соседних ячейках. В наиболее «жестком» варианте степени свободы ограничиваются вплоть до первой включительно, то есть порядок схемы становится первым.

В настоящей работе лимитер Криводоновой применяется для задач гиперупругости из раздела 3.1.

#### 4.2.3. Лимитер WENO-S

Идея алгоритма лимитирования WENO-S состоит в реконструкции решения в ячейке с помощью выпуклой комбинации решений в этой ячейке и соседних с ней. При этом решения в соседних ячейках предварительно модифицируются таким образом, чтобы сохранялось среднее по объему значение в ячейке, где решение подлежит лимитированию [120].

Алгоритм применения лимитера в одномерном случае имеет вид:

1. Обозначим полином решения в ячейках с индексами  $\alpha - 1$ ,  $\alpha$ ,  $\alpha + 1$  как  $p_0(x)$ ,  $p_1(x)$  и  $p_2(x)$ , соответственно. Модифицируем решения в соседних ячейках следующим



образом:

$$\tilde{p}_0(x) = p_0 - \bar{p}_0 + \bar{p}_1, \quad \tilde{p}_2(x) = p_2 - \bar{p}_2 + \bar{p}_1,$$

где

$$\bar{p}_\alpha = \frac{1}{h_\alpha} \int_{\omega_\alpha} p_\alpha(x) dx.$$

2. Рассчитываем индикатор гладкости для каждой из соседних ячеек:

$$\beta_\alpha = \sum_{l=1}^k \int_{\omega_\alpha} h_\alpha^{2l-1} \left( \frac{\partial^l}{\partial x^l} p_\alpha(x) \right)^2 dx,$$

где  $k$  — порядок полинома решения в ячейке.

3. Рассчитываем веса для каждой из ячеек:

$$\kappa_\alpha = \bar{\kappa}_\alpha / \sum_{n=1,2,3} \bar{\kappa}_n, \quad \bar{\kappa}_n = \gamma_n (\varepsilon + \beta_n)^{-r}.$$

Здесь  $\gamma_n$  — линейный вес;  $\varepsilon = 10^{-6}$ ,  $r = 2$  — параметры. Линейные веса должны обладать следующими свойствами:

$$\sum_{n=1}^3 \gamma_n = 1.0, \quad \gamma_1 \gg \gamma_0, \gamma_1 \gg \gamma_2.$$

4. Лимитированное решение в ячейке рассчитывается как:

$$p_1^{\text{new}}(x) = \kappa_0 \tilde{p}_0(x) + \kappa_1 p_1(x) + \kappa_2 \tilde{p}_2(x).$$

Применение лимитера может быть обобщено на многомерный случай (последовательное применение по каждому из направлений) и случай системы уравнений (применение процедуры лимитирования к каждой компоненте решения). В последнем случае, как правило, переходят к характеристическим переменным.

#### 4.2.4. Лимитер, обеспечивающий положительность объемных долей и плотностей

Пусть имеется представление какой-либо величины (компоненты вектора  $Q$ )  $Q_P(x, t)$  в ячейке  $\omega_i$ :

$$(Q_m)_h(x, t)|_{\omega_i} = \sum_{l=1}^k \psi_i^{(l)}(x) Q_{m,i}^{(l)}(t), \quad m = \overline{1, M}.$$

Введем среднее значение  $Q_m(x, t)$  как:

$$\bar{Q}_m = \frac{1}{V_i} \int_{\omega_i} (Q_m)_h(x, t) |_{\omega_i} dV.$$

Процесс лимитирования сводится к пересчету всех величин по следующей формуле:

$$\left(\tilde{Q}_m\right)_h(x, t) = \theta [(Q_m)_h(x, t) - \bar{Q}_m] + \bar{Q}_m.$$

Если  $Q_m$  определена на отрезке  $[a, b]$ , то для этой величины рассматривается параметр  $\theta_m$

$$\theta_m = \min \left\{ \frac{\bar{Q}_m - (a + \varepsilon)}{\bar{Q}_m - (Q_m)_{\min}}, \frac{\bar{Q}_m - (b - \varepsilon)}{\bar{Q}_m - (Q_m)_{\max}}, 1 \right\};$$

если  $Q_m$  определена на интервале  $[a, \infty)$ , то

$$\theta_m = \min \left\{ \frac{\bar{Q}_m - (a + \varepsilon)}{\bar{Q}_m - (Q_m)_{\min}}, 1 \right\},$$

где

$$(Q_m)_{\min} = \min_{\omega_i} (Q_m)_h(x, t) |_{\omega_i} = \min_{\mathbf{x}_{\text{gp}}} (Q_m)_h(\mathbf{x}_{\text{gp}}, t) |_{\omega_i},$$

$$(Q_m)_{\max} = \max_{\omega_i} (Q_m)_h(x, t) |_{\omega_i} = \max_{\mathbf{x}_{\text{gp}}} (Q_m)_h(\mathbf{x}_{\text{gp}}, t) |_{\omega_i},$$

$\mathbf{x}_{\text{gp}}$  – квадратурные точки конечного элемента  $\omega_i$ ,  $\varepsilon$  – малая величина, в данной работе  $\varepsilon = 10^{-6}$ .

Лимитирование применяется к величинам  $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_1\rho_1, \alpha_2\rho_2\}$ , при этом  $\alpha_{1,2}$  определены на отрезке  $[0, 1]$ ,  $\rho_{1,2}$  определены на интервале  $[0, \infty)$ . Общий коэффициент лимитирования рассчитывается как

$$\theta = \min_m \{\theta_m\}.$$

Затем операция лимитирования с общим коэффициентом  $\theta$  применяется ко всем величинам  $\mathbf{Q}$ :

$$\left(\tilde{Q}_m\right)_h(x, t) = \theta ((Q_m)_h(x, t) - \bar{Q}_m) + \bar{Q}_m, \quad m = \overline{1, M}.$$

#### 4.2.5. Комплексное лимитирование

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 задач такого типа 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 был разработан комплексный алгоритм лимитирования, описанный ниже.

Пусть имеется представление какой-либо величины (компоненты вектора  $\mathbf{Q}$ )  $Q_P(x, t)$  в ячейке  $\omega_i$ :

$$(Q_m)_h(x, t)|_{\omega_i} = \sum_{l=1}^k \psi_i^{(l)}(x) Q_{m,i}^{(l)}(t), \quad m = \overline{1, M}.$$

1. Для набора консервативных переменных в ячейке применяется описанное выше лимитирование WENO-S из раздела 4.2.3.
2. Если в какой-либо квадратурной точке значение одной из следующих величин  $\{\alpha_k, \alpha_k \rho_k\}$ ,  $k = 1, 2$  отрицательно, то применяется процедура лимитирования из раздела 4.2.4.
3. В каждой квадратурной точке внутри расчетной ячейки для полученного лимитированного решения ищутся простые переменные для каждой из фаз с номерами  $k = 1, 2$  по следующим формулам:

$$u_k^{\text{new}} = \frac{(\alpha_k \rho_k u_k)^{\text{new}}}{(\alpha_k \rho_k)^{\text{new}}}, \quad v_k^{\text{new}} = \frac{(\alpha_k \rho_k v_k)^{\text{new}}}{(\alpha_k \rho_k)^{\text{new}}}, \quad w_k^{\text{new}} = \frac{(\alpha_k \rho_k w_k)^{\text{new}}}{(\alpha_k \rho_k)^{\text{new}}},$$

$$E_k^{\text{new}} = \frac{(\alpha_k \rho_k E_k)^{\text{new}}}{(\alpha_k \rho_k)^{\text{new}}},$$

где  $u_k, v_k, w_k$  — компоненты вектора скорости  $\mathbf{u}_k$ .

4. В каждой квадратурной точке внутри расчетной ячейки находится внутренняя энергия для каждой из фаз с номерами  $k = 1, 2$  по следующей формуле

$$\mathcal{U}_k^{\text{new}} = E_k^{\text{new}} - \frac{(u_k^{\text{new}})^2 + (v_k^{\text{new}})^2 + (w_k^{\text{new}})^2}{2}.$$

5. Если внутренняя энергия хотя бы в одной квадратурной точке ячейки  $\omega_i$  для какой-либо фазы отрицательна, то в  $\omega_i$  для полной энергии данной фазы  $(\alpha_k \rho_k E_k)^{\text{new}}$  в консервативном виде применяется дополнительная процедура лимитирования. В простейшем случае она заключается в том, что в решении оставляются только нулевые гармоники.

Разработанный алгоритм лимитирования используется в численных экспериментах из соответствующего раздела.

## Глава 5. Описание программной реализации

Описанные в главе 4 вычислительные алгоритмы реализованы программно в рамках комплекса DIMP-MULTIPHASE, который, в свою очередь, основан на платформе DIMP, разрабатываемый в ИПИМ им. М. В. Келдыша РАН [24].

### § 5.1. Архитектура программного комплекса

Программный комплекс DIMP представляет собой двухступенчатую структуру. Первая ступень является подготовительной частью. Эта часть кода во многом универсальна и является общей для многих задач, которые можно решать с использованием явных схем на декартовой сетке [24]. Ее основные функции:

1. считывание и обработка конфигурационных параметров, таких как начальные данные, параметры уравнений состояния, иные физические параметры, необходимые для расчета, а также вспомогательные параметры, отвечающие за параметры вывода данных в терминал и файлы;
2. создание расчетной сетки и ее декомпозиция для подготовки к параллельному расчету
3. организация межпроцессорного взаимодействия

Вторая ступень является основной частью. Ее структура определяется конкретной физико-математической моделью, а также используемой разностной схемой. Вторая ступень предоставляет возможность применения программного комплекса на достаточно широком классе задач в рамках воксельной геометрической постановки. В первую очередь, это обеспечено особенностью подхода, при которой две ступени при реализации отделены друг от друга (см. схему на рисунке 5.1): подготовительная часть реализована в виде программной платформы DiMP, а основная – в виде программных комплексов DIMP-Hydro и DIMP-Multiphase.

Языком реализации является C++ с использованием интерфейса MPI [125] для распараллеливания программы. Разбиение расчетной сетки для межпроцессорного обмена осуществляется с помощью библиотеки Metis [126]. Для написания конфигурационных файлов используется встраиваемый язык программирования Lua [127]. Выбор данного языка обусловлен возможностью использования собственных функций, структур данных, а также реализации части функциональности программы на уровне конфигурационного файла. На рисунке 5.2 приведен пример конфигурационного файла

для расчета двухфазного вытеснения в образце керна с помощью DIMP-Hydro. Результаты расчетов (распределение полей всех параметров) могут быть сохранены в формате VTK [128].

## § 5.2. DIMP-MULTIPHASE как часть программного комплекса

В диссертационной работе был реализован программный комплекс DIMP-Multiphase, состоящий в свою очередь из двух модулей: DIMP-Hyper для решения задач гиперупругости и DIMP-BN для решения задач многофазных течений. Общая база на основе вычислительных алгоритмов реализована на уровне DIMP-Multiphase и предоставляет возможность проведения расчетов с использованием метода RK/DG с выполнением решения до произвольного порядка, а также интегрирование по времени методом Рунге-Кутты, задаваемом с помощью таблицы Бутчера. В качестве вспомогательных библиотек на уровне DIMP-Multiphase используются библиотеки BOOST [129] и EIGEN [130].

Особенностью программной реализации модуля DIMP-Hyper является использование непосредственно термодинамического потенциала (внутренней энергии) в своих естественных переменных при расчете термодинамических свойств среды. Для этого применяются программные библиотеки для автоматического дифференцирования (библиотека STAN, [131]). Термодинамические параметры (тензор напряжения и акустический тензор, температура, ...) вычисляются *непосредственно* как производные термодинамического потенциала. Это дает возможность использовать различные виды тензора градиента деформации (Фингера, Грина и других), а также любой термодинамический потенциал в естественных переменных в качестве канонического уравнения состояния без существенного изменения программы.

Особенностью программной реализации модуля DIMP-BN является возможность расширения математической модели до произвольного числа фаз, а также применение широкого спектра типов уравнений состояния.

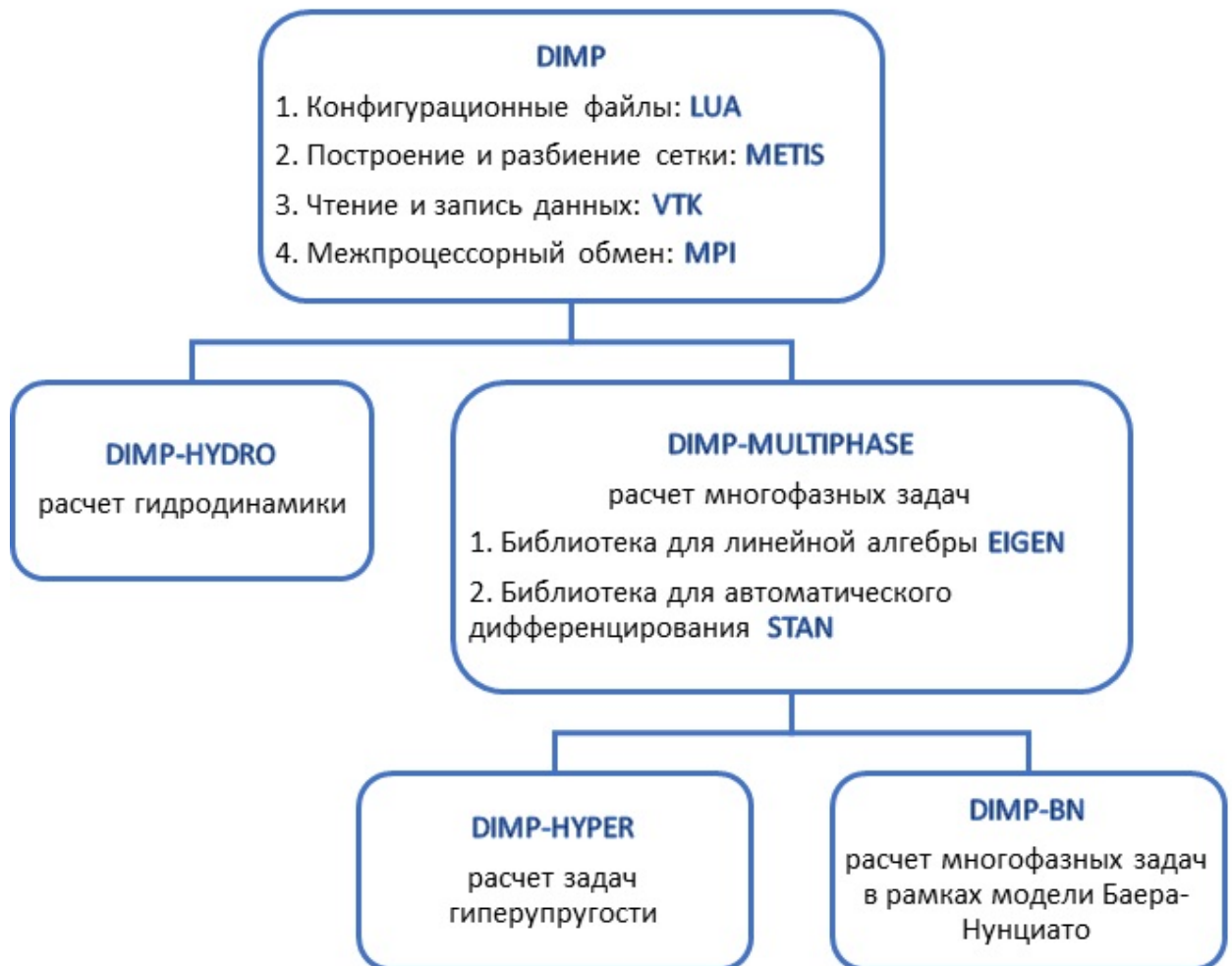


Рис. 5.1. Структура кода программного комплекса DIMP.

```

1 Source = "RAW" -- read simulation geometry from File
2 File = "../sandstone_3.raw" -- path to binarized core sample image
3
4 nx = 300 -- number of cells along Ox axis
5 ny = 300 -- number of cells along Oy axis
6 nz = 300 -- number of cells along Oz axis
7
8 A_psi = 1e+4 -- coefficient in double well potential [J/kg]
9 lambda_1 = 1.25e-4 -- gradient energy coefficient [J*m^2/kg]
10 contact_angle = 30 -- value of contact (wetting) angle [degrees]
11 init_density = 1 -- initial density [kg/m^3]
12 init_velocity_x = 0.0 -- initial velocity, x-component [m/s]
13 init_velocity_y = 0.0 -- initial velocity, y-component [m/s]
14 init_velocity_z = 0.0 -- initial velocity, z-component [m/s]
15 dynamic_viscosity = 5e-3 -- dynamic viscosity [Pa*s]
16 sound_speed = 500 -- speed of sound [m/s]
17 mobility_zero = 5e-10 -- component mobility [kg*s/m^3]
18 qhd_alpha = 0.5 -- qhd-regularization parameter
19
20 space_step = 1e-4 -- value of space step [m]
21 time_step = 6e-8 -- value of initial time step [sec]
22 until_iter = 2e+8 -- whole number of iterations
23 write_iter = 1000 -- save simulation results on every 1000-th iteration
24 use_contig_partition = 1 -- contiguity option (Metis)
25 activity_flag = 0 -- pore space voxel identifier
26
27 Lx = nx*space_step -- size of simulation domain along Ox [m]
28 Ly = ny*space_step -- size of simulation domain along Oy [m]
29 Lz = nz*space_step -- size of simulation domain along Oz [m]
30
31 -- boundary conditions on sides of simulation domain
32 Top = "WALL" -- solid wall
33 Bottom = "WALL" -- solid wall
34 Back = "WALL" -- solid wall
35 Front = "WALL" -- solid wall
36 Left = "IFLW" -- inflow
37 Right = "OFLW" -- outflow
38
39 -- initial distribution of concentration
40 function Concentration(x,y,z)
41     if (y < 0.1*Ly)
42         return 1.0
43     else
44         return 0.0
45     end
46 end

```

Рис. 5.2. Пример конфигурационного файла на языке Lua для численного моделирования двухфазного вытеснения в образце горной породы из работы [24].

## Глава 6. Результаты расчетов

В данной главе представлены результаты расчетов для представленных моделей Годунова-Роменского и Баера-Нунциато. Расчеты выполнены на декартовых ортогональных воксельных сетках с использованием вычислительных алгоритмов, описанных в главе 4. Конкретные варианты алгоритмов отдельно указаны для каждого семейства тестовых задач.

### § 6.1. Расчеты для гиперупругих моделей

#### 6.1.1. Расчеты в рамках однородной модели

В данном разделе приведены результаты расчетов с использованием модели Годунова-Роменского для однородной и неоднородной среды. В тестовых расчетах рассматриваются известные модельные задачи для упругих твердых сред, а также газодинамические задачи. Начальные данные для тестов представлены в таблице 6.1. Параметры уравнения состояния, представленные в таблице 6.2, соответствуют следующим величинам:  $\rho_0$ , г/см<sup>3</sup> — невозмущенная плотность среды,  $c_0$ , км/с — скорость звука (как формальный параметр уравнения состояния (3.6)),  $c_v$ , кДж/(г К) — теплоемкость,  $T_0$ , К — отсчетное значение температуры,  $b_0$ , км/с — скорость сдвиговой волны,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  — коэффициенты

**Тест 1. Газовая динамика.** Как уже отмечалось, модель Годунова-Роменского позволяет описывать течения газа и при соответствующем задании уравнения состояния сводится к уравнениями Эйлера идеальной газовой динамики. Поэтому в качестве первого тестового примера рассмотрим газодинамическую задачу Сода об ударной трубе, которая будет решена с использованием полной систему уравнений Годунова-Роменского, состоящей из 13 уравнений и не включающую в себя в явном виде уравнение закона сохранения массы (уравнения неразрывности).

Подробно задача описана в множестве источников, см., например, [132]. В ней рассматриваются ударноволновые течения с распадом разрыва на контактных границах газа. Начальные данные и параметры уравнения состояния заданы в таблицах 6.1 и 6.2 соответственно. Начальные данные были получены на основе заданных начальных условий для задачи Сода для уравнений Эйлера идеальной газовой динамики.



Таблица 6.1. Начальные данные для одномерных тестов задач гиперупругости

	$\mathbf{u}_L, \frac{\text{км}}{\text{с}}$	$\mathbf{F}_L$	$\mathcal{S}_L, \frac{\text{кДж}}{\text{гК}}$	$\mathbf{u}_R, \frac{\text{км}}{\text{с}}$	$\mathbf{F}_R$	$\mathcal{S}_R, \frac{\text{кДж}}{\text{гК}}$
1	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$4.0 \cdot 10^{-6}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$
2	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0.5 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.98 & 0 & 0 \\ 0.02 & 1 & 0.1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0.1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	0
3	$\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0.1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.01 & 0.95 & 0.02 \\ -0.015 & 0 & 0.9 \end{pmatrix}$	0	$\begin{pmatrix} 0 \\ -0.03 \\ -0.01 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.015 & 0.95 & 0 \\ -0.01 & 0 & 0.9 \end{pmatrix}$	0

Таблица 6.2. Параметры уравнений состояния для одномерных тестов задач гиперупругости

	$\rho_0, \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	$c_0, \frac{\text{км}}{\text{с}}$	$c_v, \frac{\text{кДж}}{\text{гК}}$	$T_0, \text{К}$	$b_0, \frac{\text{км}}{\text{с}}$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
Тест 1	1.0	0.0	$1.0 \cdot 10^{-6}$	100	0	0	0	0.4
Тест 2	8.93	4.6	$3.9 \cdot 10^{-4}$	300	2.1	1	3	2
Тест 3								
материал 1	8.93	4.6	$3.9 \cdot 10^{-4}$	300	2.1	1	3	2
материал 2	8.93	6.22	$9.0 \cdot 10^{-4}$	300	3.16	1	3.577	2.088

В расчете используется сетка с шагом по пространству 0.001 см на области  $[0, 1]$  см. Шаг по времени равен 0.01 секунд. Применяется алгебраическое восполнение решения до 3-го порядка. При этом решается 13 уравнений для неизвестных  $(u_k, F_{ij}, S)$  вместо 5 уравнений для трех компонент скорости и двух термодинамических переменных (например, плотности и давления или внутренней энергии). Уравнение состояния состоит только из термодинамической части (3.6)

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}^h(I_3, S) = c_v T_0 I_3^{\gamma/2} (\exp[S/c_v] - 1).$$

В рассматриваемой постановке тензор градиента деформации имеет диагональный вид.

Возникающее течение содержит пять подобластей с различными значениями скорости, энергии (давления) и плотности, которые показаны на рисунке 6.1, соответственно, красным, черным и зеленым цветом в момент времени  $t = 0.6$  с. анализ результатов показывает, что полученное решение совпадает с решением чисто газодинамической задачи, см., например, [132].

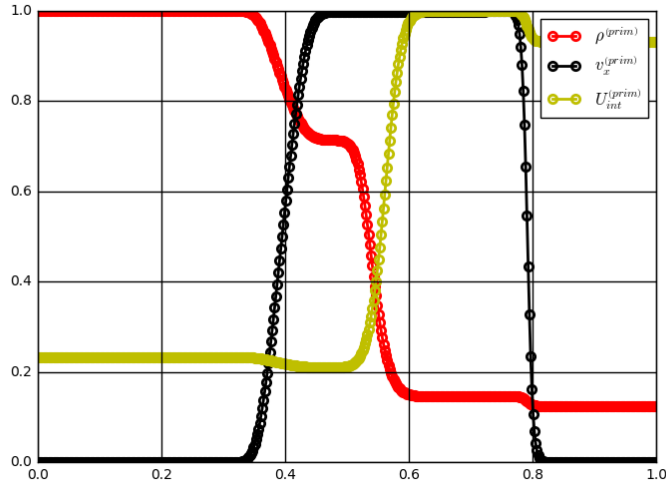


Рис. 6.1. Тест 1. Профили плотности, скорости и энергии, восполнение 1-го порядка.

Таким образом, данная модель позволяет рассматривать газодинамические постановки задач.

**Тест 2. Нелинейная гиперупругость.** Во втором тесте рассматривается упругая среда с полным уравнением состояния. Начальные условия соответствуют решению задачи с пятью волнами, однако при добавлении небольших сдвиговых деформаций (недиагональные члены в тензоре дисторсии) решение будет состоять из семи волн: три движущиеся влево волны разрежения, движущийся вправо контактный разрыв, две движущиеся вправо волны разрежения перед ударной волной и движущаяся вправо ударная волна.

Задача решается разрывным методом Галеркина с алгебраическим восполнением решения третьего порядка на сетке, состоящей из 500 ячеек. В качестве сравнения рассматривается решение, полученное методом конечных объемов, на существенно более мелкой сетке, состоящей из 1000 ячеек. Начальные условия взяты из работы [58] и представлены в таблице 6.1. Параметры уравнения состояния соответствуют меди и представлены в таблице 6.2

Результаты расчетов представлены на рисунке 6.2 на момент времени  $0.5 \mu\text{s}$  для решения с использованием метода конечных объемов первого порядка, а также разрывного метода Галеркина. В качестве лимитирования используется, как отмечалось выше, лимитер Криводоновой. Видно, что разрывный метод Галёркина дает гораздо лучшее разрешение фронтов по сравнению с методом конечных объемов. По полученным профилям решений можно идентифицировать все 7 представленных волн. Полученные результаты полностью совпадают с опубликованными в известных работах, см. [58].

**Тест 3. Неоднородная модель Годунова-Роменского.** Рассмотрим пример решения задачи гиперупругости в рамках неоднородной модели, описанной выше. При этом

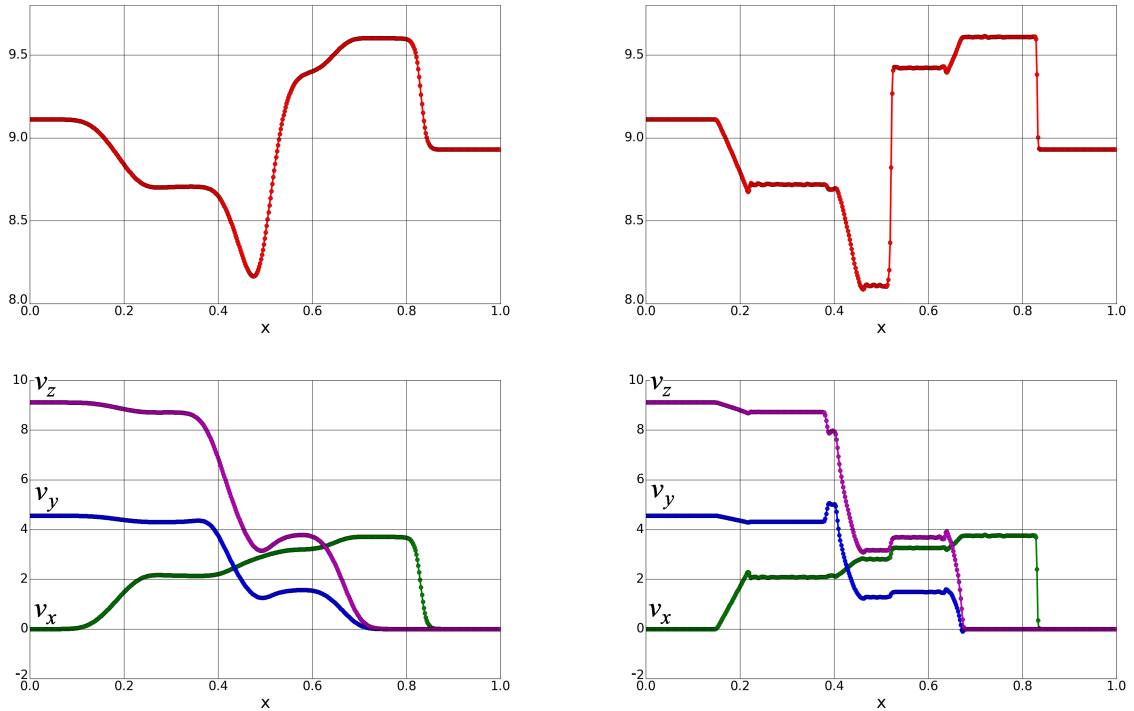


Рис. 6.2. Тест 2. Распределение плотности (сверху) и скорости (снизу) для метода конечных объемов (слева) и RK/DG (справа)

граница раздела двух различных материалов определяется характеристической функцией. Левые и правые начальные условия ставятся по границе материалов. Поле  $\phi$  в начальный момент времени задано как:

$$\phi(x, 0) = \begin{cases} 10^{-4}, & x \leq 0.5, \\ 1 - 10^{-4}, & x > 0.5. \end{cases} \quad (6.1)$$

Сетка состоит из 2000 ячеек на отрезке  $[0, 1]$ . Используется алгебраическое восполнение решения третьего порядка. Лимитирование производится с помощью лимитера Криводоновой для физических полей и лимитера, обеспечивающего нахождение решения в заданном интервале, для поля  $\phi$ . Начальные условия заданы в таблице 6.1. Параметры уравнения состояния левого и правого материалов заданы в таблице 6.2.

Решение задачи в момент времени  $t = 0.5 \mu\text{s}$  представлено на рисунках 6.3-6.5. Граница раздела материалов движется слева направо. Левые изображения соответствуют профилям величин в заданный момент времени, на правых приведены соответствующие  $x - t$  диаграммы, где вертикальная ось соответствует времени, а горизонтальная — пространственной координате.

На рисунке 6.3 представлено распределение плотности на момент  $t = 0.5 \mu\text{s}$  и соответствующая  $x - t$  диаграмма. На рисунке 6.4 показано распределение скорости на тот же момент времени и соответствующая  $x - t$  диаграмма. На границе раздела материалов на профиле видно небольшое возмущение. На рисунке 6.5 представлено

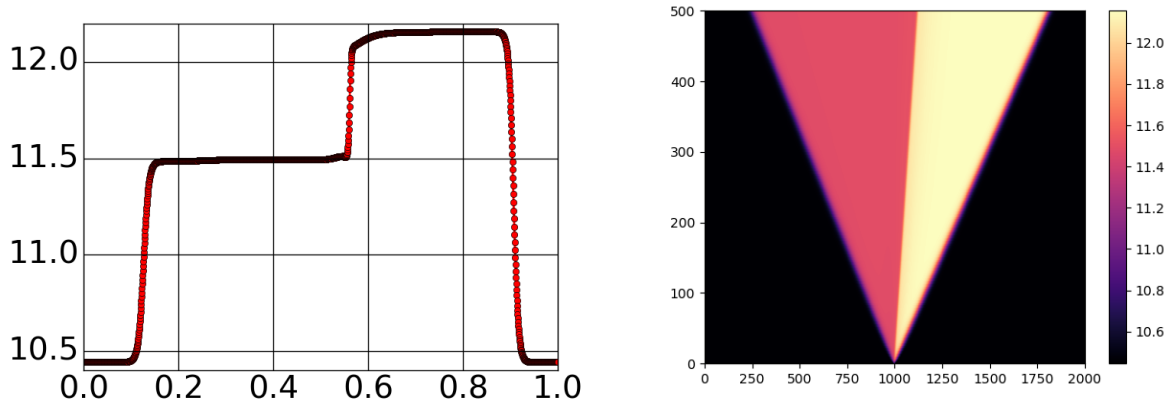


Рис. 6.3. Тест 3. Распределение плотности на момент  $t = 0.5 \mu\text{s}$  (слева) и  $x - t$  диаграмма (справа)

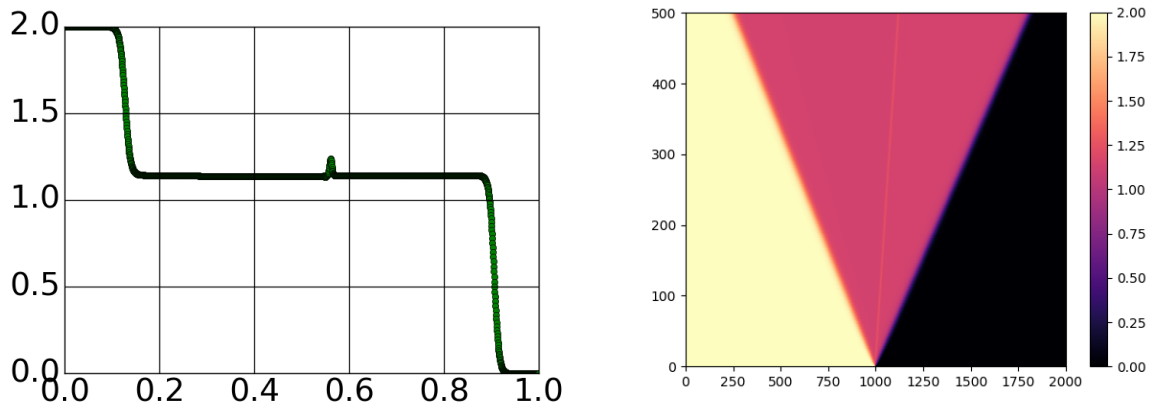


Рис. 6.4. Тест 3. Распределение скорости на момент  $t = 0.5 \mu\text{s}$  (слева) и  $x - t$  диаграмма (справа)

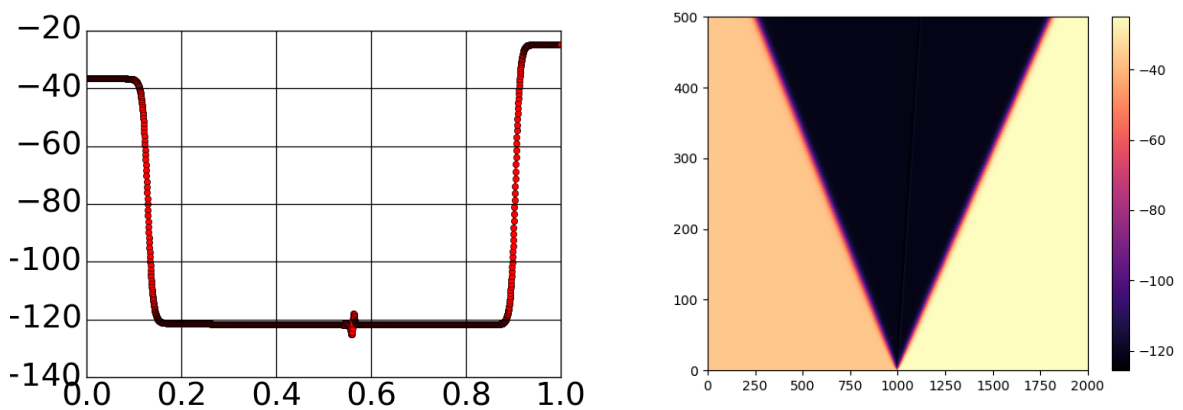


Рис. 6.5. Тест 3. Распределение компоненты  $\sigma_{11}$  тензора напряжений на момент  $t = 0.5 \mu\text{s}$  (слева) и  $x - t$  диаграмма (справа)

распределение компоненты  $\sigma_{11}$  тензора напряжений на момент  $t = 0.5 \mu\text{с}$  и соответствующая  $x - t$  диаграмма.

#### Тест 4. Пример трехмерного расчета для однородной модели

**Годунова-Роменского.** В трехмерной постановке рассматривается сферически симметричная задача, в которой начальные условия соответствуют одинаковой плотности во всей области и сильному возмущению энергии в ее центре. Параметры уравнения состояния и начальные данные заданы аналогично Тесту 1 со сферической симметрией, где левое состояние соответствует состоянию снаружи сферы, а правое - внутри сферы. Данный тест демонстрирует возможность применения разработанного комплекса программ для ресурсоемких задач, в частности, сложных трехмерных постановок.

В особенностях численной реализации стоит отметить, что расчетная область разбита сеткой размерностью  $300 \times 300 \times 300$  ячеек; параметры уравнения состояния соответствуют меди; в задаче имеется сферическая симметрия и расчет проводится с параллельностью в рамках MPI. Количество ядер, задаваемое в расчете, — 120. На рисунке 6.6 показано распространение возмущения от центра расчетной области, движущееся к границам. Данная задача рассчитывалась с использованием параллельного варианта алгоритма. Численные потоки рассчитываются по формуле Русанова.

## § 6.2. Результаты численных экспериментов для модели Баера-Нунциато

Численные эксперименты проводились с шагом интегрирования, рассчитанным из условия Куранта:

$$\Delta t = \text{CFL} \frac{\min_k (\Delta x_k)}{\lambda_{\max}} \quad (6.2)$$

где  $\text{CFL} = 0.9$  для  $l = 0$  и  $\text{CFL} = 0.2$  для  $l = 1$ ,  $\lambda_{\max}$  — максимальное собственное значение системы уравнений (3.9).

### 6.2.1. Тестовые расчеты без релаксации

В данном разделе представлены результаты численных экспериментов для модели Баера-Нунциато без релаксационных слагаемых. Цель данных тестов — продемонстрировать возможность применения представленного подхода к модельным задачам. Тесты 1 и 2 взяты из работы [133] и соответствуют одномерным задачам Римана и показывают некоторые возможности разработанной численной схемы. В частности, тест 1 демонстрирует возможности представленного лимитера WENO-S, а тест 2 — способность разработанной схемы сохранять положительность некоторых физических величин. Тест 3, взятый из работы [134], анализирует влияние порядка алгебраического восполнения решения на качество получаемых результатов. В тестах 4 и 5 демонстрируется возможность применения представленного подхода к вычислительно затратным

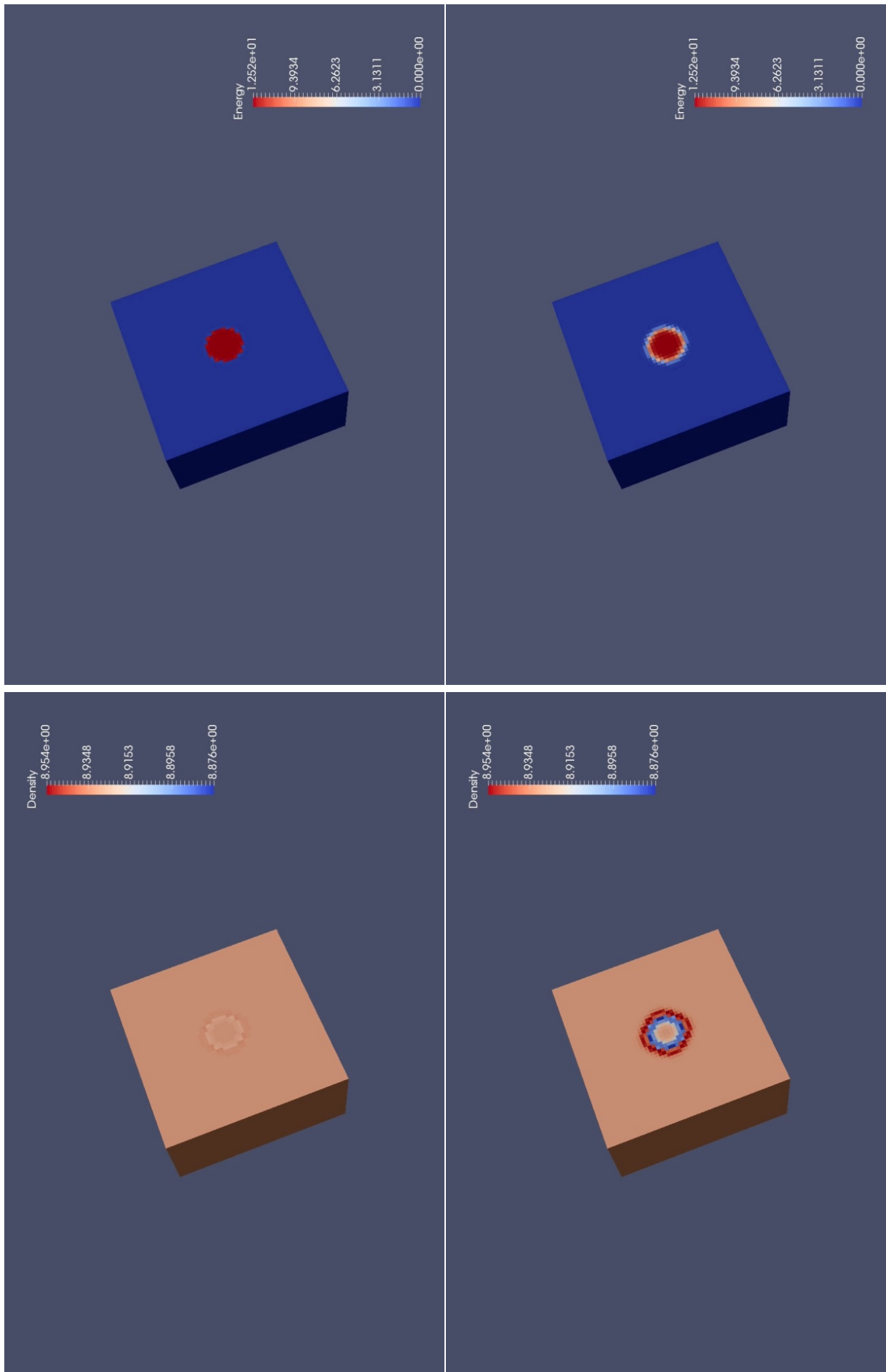


Рис. 6.6. Тест 4. Распределение плотности (слева) и энергии (справа) на моменты времени  $t = 0$  с (сверху) и  $t = 0.5$  с (снизу)

и ресурсоемким задачам. Тест 4 взят из работы [135]. Тест 5 представляет собой обобщение теста 4 на случай множества пузырьков.

**Тест 1.** В данном тесте рассматривается одномерная постановка задачи. Расчеты проводились в области с размером  $L_x = 1$  м. Шаг по времени составил  $10^{-3}$  с. Число ячеек  $N_x = 100$ . Расчеты проводились до времени 0.15 с. Результаты приведены для схемы с алгебраическим восполнением решения нулевого порядка (константы в каждой расчетной ячейке) и первого порядка (кусочно-линейное решение в каждой расчетной ячейке). Для второго случая используется лимитирование WENO-S. Начальные данные заданы в таблице 6.3. Параметры уравнения состояния для каждой из фаз заданы в таблице 6.3.

Решение для жидкой фазы состоит из левой волны разрежения, правой ударной волны и правого движущегося контактного разрыва. Решение для газовой фазы состоит из левой волны разрежения, контактного разрыва и правой ударной волны. Из рисунков 6.7 видно, что техника лимитирования дает осцилляции на консервативном поле скоростей.

**Тест 2.** В данном тесте рассматривается одномерная постановка задачи. Расчеты проводились в области с размером  $L_x = 1$  м. Шаг по времени составил  $10^{-4}$  с. Число ячеек  $N_x = 100$ . Расчеты проводились до времени  $t = 0.01$  с. Начальные данные и параметры уравнения состояния для каждой из фаз приведены в таблице 6.3.

В данном тесте две волны разрежения расходятся от центра расчетной области в противоположные стороны. Область между волнами близка к вакууму – в ней образуется почти нулевое давление. Таким образом, в данном тесте анализируется способность схемы сохранять положительность некоторых физических полей (например, давления в случае, когда его значение близко к нулю). Для представленной в работе численной схемы давление в данном тесте остается положительным на протяжении всего расчета, что видно из представленных рисунков 6.8. Решение осуществлялось с помощью разрывного метода Галеркина с использованием лимитирования WENO-S.

Таким образом, данная численная схема корректно работает в случае значений, близких к нулевым.

**Тест 3.** В данном тесте рассматривается двумерная постановка задачи. Расчеты проводились в области с размерами  $L_x = 1$  м,  $L_y = 1$  м. Шаг по времени составил  $10^{-4}$  с. Число ячеек по каждому направлению  $N_x = 50$ ,  $N_y = 50$ . Начальные условия и параметры уравнения состояния для каждой из фаз представлены в таблице 6.3.

Для данного теста было проведено две серии расчетов, которые отличаются представлением решения в расчетных ячейках. Базисные функции состоят из следующих одномерных полиномов Лежандра в локальных координатах:  $\psi_0^x = 1$ ,  $\psi_1^x = x$ ,  $\psi_0^y = 1$ ,  $\psi_1^y = y$ . В первом расчете базисные функции являются результатом полного тензорного произведения представленных одномерных полиномов:  $\Psi_0 = \psi_0^x \psi_0^y = 1$ ,  $\Psi_1 = \psi_1^x \psi_0^y = x$ ,  $\Psi_2 = \psi_0^x \psi_1^y = y$ ,  $\Psi_3 = \psi_1^x \psi_1^y = xy$ . Во втором расчете используются базисные функции

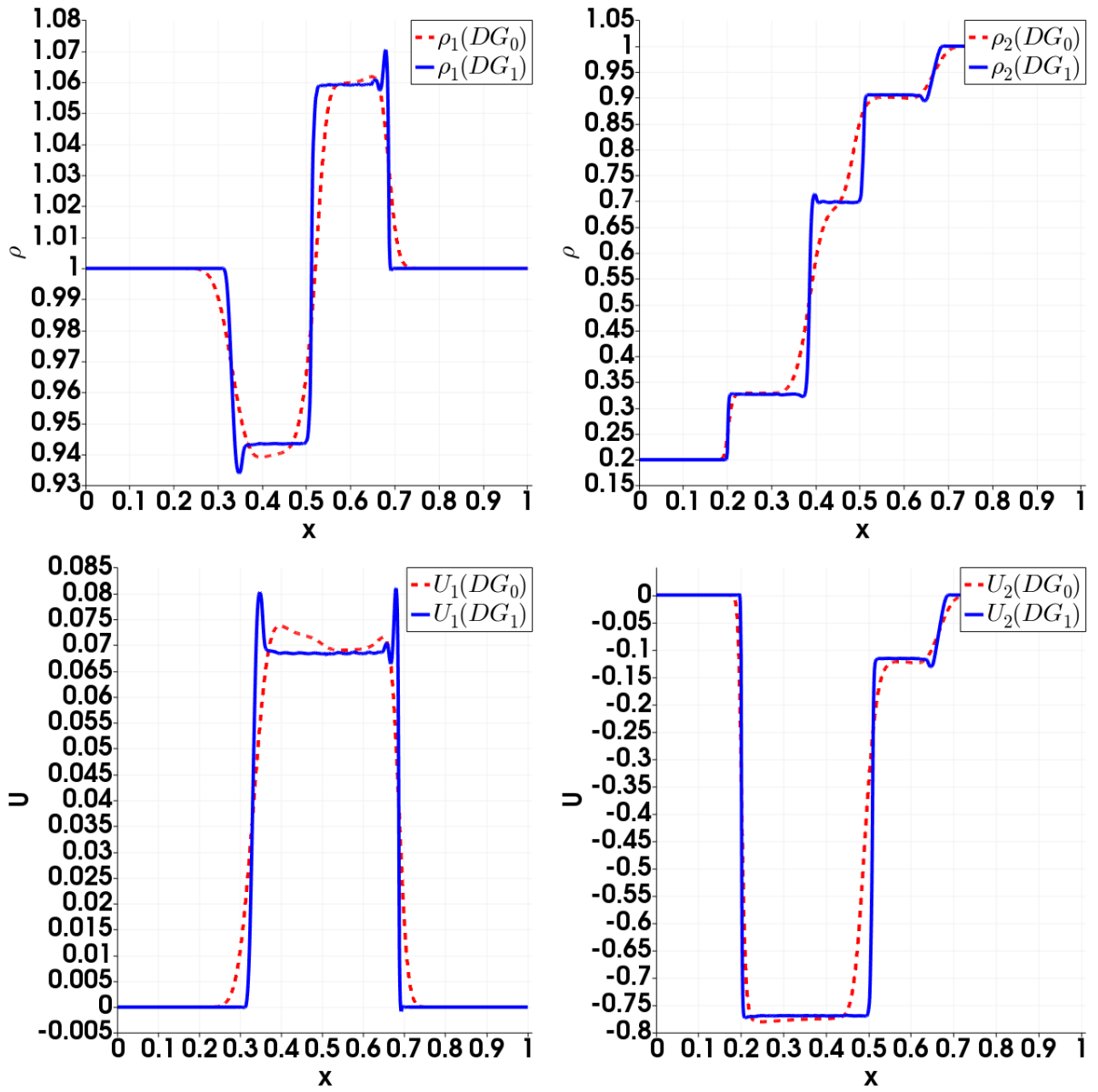


Рис. 6.7. Тест 1. Профили (слева направо) плотности фазы 1, плотности фазы 2, скорости фазы 1, скорости фазы 2 в момент времени  $t = 0.15$  с.



Таблица 6.3. Начальные данные тестов без релаксации

Тест	Начальные данные			Тип УС	Параметры
Тесты 1D					
	$x < x_0$	$x > x_0$			
1	$\alpha_1 = 0.8, \alpha_2 = 0.2,$ $\rho_1 = 1.0, \rho_2 = 0.2,$ $u_1 = 0.0, u_2 = 0.0,$ $P_1 = 1.0, P_2 = 0.3$	$\alpha_1 = 0.3, \alpha_2 = 0.7,$ $\rho_1 = 1.0, \rho_2 = 1.0,$ $u_1 = 0.0, u_2 = 0.0,$ $P_1 = 1.0, P_2 = 1.0$		УС (3.11)	$\gamma_1 = 1.4,$ $\pi_1 = 0.0,$ $\gamma_2 = 1.4,$ $\pi_2 = 0.0,$ $x_0 = 0.5,$ $t_* = 0.15$
2	$\alpha_1 = 0.8, \alpha_2 = 0.2,$ $\rho_1 = 1.0, \rho_2 = 1.0,$ $u_1 = -2.0, u_2 = -2.0,$ $P_1 = 0.4, P_2 = 0.4$	$\alpha_1 = 0.5, \alpha_2 = 0.5,$ $\rho_1 = 1.0, \rho_2 = 1.0,$ $u_1 = 2.0, u_2 = 2.0,$ $P_1 = 0.4, P_2 = 0.4$		УС (3.11)	$\gamma_1 = 1.4,$ $\pi_1 = 0.0,$ $\gamma_2 = 1.4,$ $\pi_2 = 0.0,$ $x_0 = 0.5,$ $t_* = 0.01$
Тесты 2D					
3	$\alpha_1$ — см. (6.3), $\alpha_2$ — см. (6.4), $\rho_1$ — см. (6.5), $\rho_2$ — см. (6.6), $u_1 = 10.0, u_2 = 10.0,$ $v_1 = 10.0, v_2 = 10.0,$ $P_1 = 1.0, P_2 = 0.3$			УС (3.11)	$\gamma_1 = 1.4,$ $\pi_1 = 0.0,$ $\gamma_2 = 1.648,$ $\pi_2 = 0.0,$ $t_* = 1.0$
4, 5	состояние до УВ	состояние после УВ	состояние внутри пузырька	УС (3.11)	$\gamma_1 = 3.0,$ $\pi_1 = 100.0,$ $\gamma_2 = 1.4,$ $\pi_2 = 0.0,$ $t_* = 2.0$
	$\alpha_1 = 0.75,$ $\alpha_2 = 0.25,$ $\rho_1 = 2000.0,$ $\rho_2 = 1.0,$ $u_1 = 50.0,$ $u_2 = 0.0,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $P_1 = 5.0 \cdot 10^6,$ $P_2 = 1.0$	$\alpha_1 = 0.75,$ $\alpha_2 = 0.25,$ $\rho_1 = 1000.0,$ $\rho_2 = 1.0,$ $u_1 = 50.0,$ $u_2 = 0.0,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $P_1 = 1.0,$ $P_2 = 1.0$	$\alpha_1 = 0.25,$ $\alpha_2 = 0.75,$ $\rho_1 = 1000.0,$ $\rho_2 = 1.0,$ $u_1 = 50.0,$ $u_2 = 0.0,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $P_1 = 1.0,$ $P_2 = 1.0$		

степени не выше одного, т.е.  $\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2$ . Таким образом, в каждой из ячеек решение имело вид, как представлено в таблице 6.4. В дальнейших обозначениях будем считать базис из первой строки таблицы 6.4 базисом под номером 1, а базис из второй строки – под номером 2. В данном расчете начальное возмущение двигалось по диагонали, таким образом, можно наблюдать, что вдоль осей появляется осцилляция решения. Результаты расчета представлены на рисунках 6.9 для разных моментов расчета. Видно, что в первой серии расчетов данный эффект отсутствует. Решение производилось с помощью разрывного метода Галеркина без использования лимитирования.

Таблица 6.4. Представление решения  $q$  в ячейке в локальных координатах

1	$q(x, y, t) = q_0(t) + q_1(t)x + q_2(t)y + q_3(t)xy$
2	$q(x, y, t) = q_0(t) + q_1(t)x + q_2(t)y$

Объемные доли задаются формулами:

$$\alpha_1 = 0.6 + \begin{cases} 3 \exp\left(\frac{1}{10(r_\alpha - 0.2)(r_\alpha + 0.2)}\right) & r_\alpha < 0.2, \\ 0 & r_\alpha \geq 0.2; \end{cases} \quad (6.3)$$

$$\alpha_2 = 1.0 - \alpha_1. \quad (6.4)$$

Плотности задаются как:

$$\rho_1 = 1.0 + 5 \cdot \begin{cases} 10^8 (r_{\rho_1} - 0.1)^4 (r_{\rho_1} + 0.1)^4 & r_{\rho_1} < 0.1 \\ 0 & r_{\rho_1} \geq 0.1 \end{cases} \quad (6.5)$$

$$\rho_2 = 0.001 + 0.003 \cdot \begin{cases} 10^8 (r_{\rho_2} - 0.1)^4 (r_{\rho_2} + 0.1)^4 & r_{\rho_2} < 0.1 \\ 0 & r_{\rho_2} \geq 0.1 \end{cases} \quad (6.6)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$r_\alpha = \sqrt{(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2};$$

$$r_{\rho_1} = \sqrt{(x - 0.4)^2 + (y - 0.5)^2};$$

$$r_{\rho_2} = \sqrt{(x - 0.6)^2 + (y - 0.5)^2}.$$

**Тест 4.** Рассматривается задача о взаимодействии распространяющейся по жидкости ударной волны с расположенным в ней пузырьком из газа. Схематическая постановка задачи о прохождении ударной волны через среду, содержащую пузырек, представлена на рисунке 6.10. На поздних этапах расчета появляются неустойчивости Рихтмайера-Мешкова. Начальные данные во внешней области представлены в таблице 6.3. Начальные данные внутри пузыря заданы в таблице 6.3. Параметры уравнения состояния для каждой из фаз представлены в таблице 6.3. Расчеты проводились в прямоугольной области с размерами  $L_x = 3.5$  м и  $L_y = 1.5$  м. Шаг по времени составил  $10^{-7}$  с. Число ячеек по каждому направлению  $N_x = 800$ ,  $N_y = 345$ . На рисунках 6.11 справа для данного теста представлено значение численного шпирена по формуле

$$\psi = \exp\left[-(10\alpha_1 + 60\alpha_2) \frac{\|\nabla\rho\|}{\rho}\right].$$

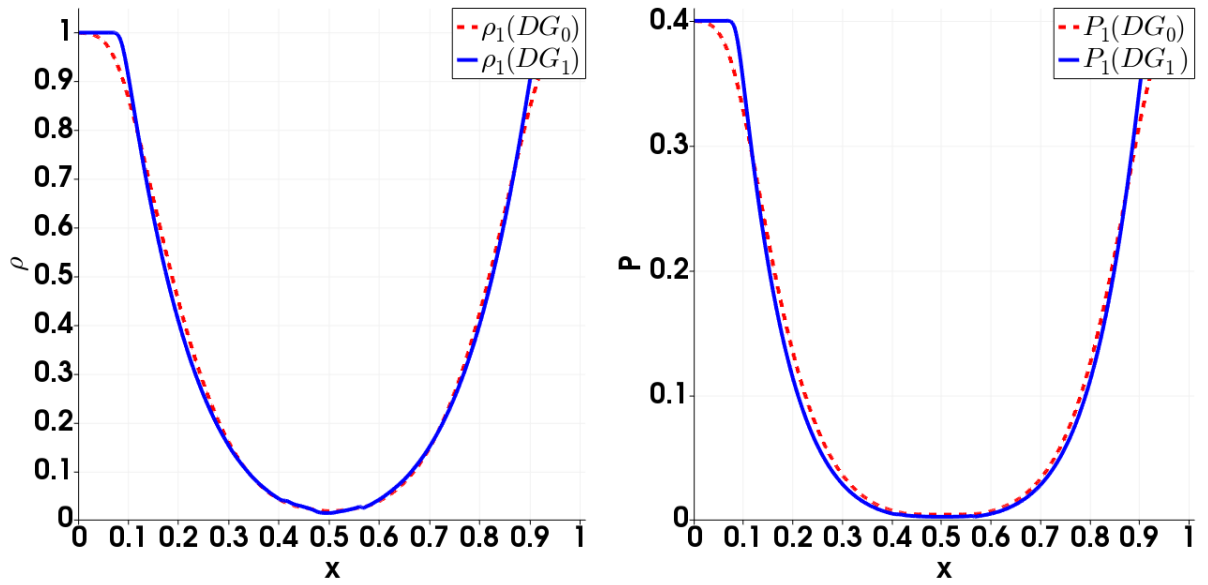


Рис. 6.8. Тест 2. Профиль плотности(слева) и давления(справа) в момент времени  $t = 0.01$  с.

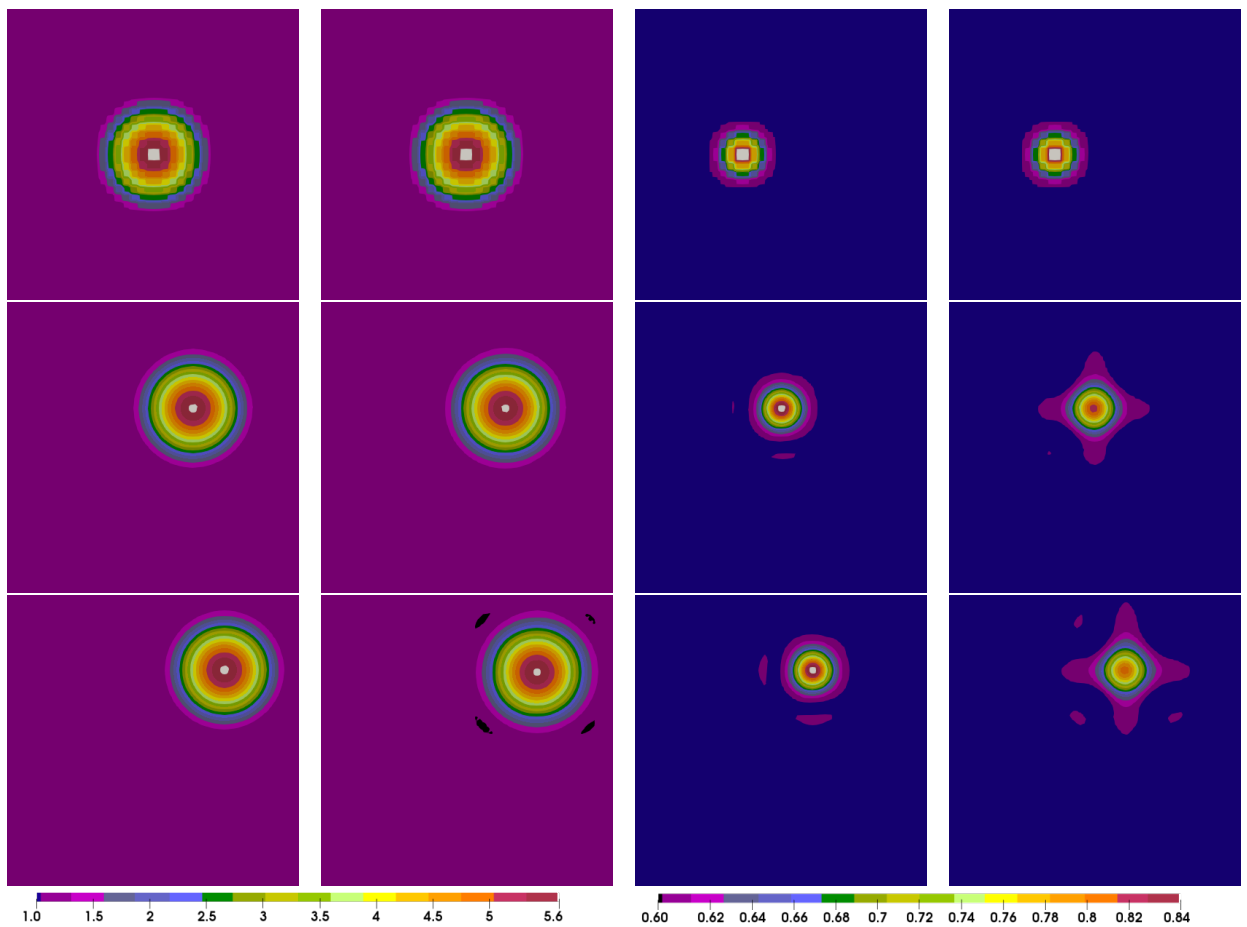
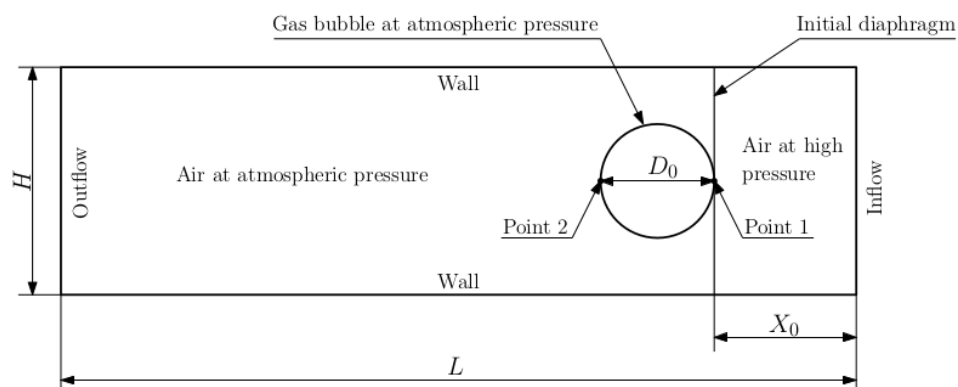


Рис. 6.9. Тест 3. Сравнение концентрации и плотности фазы 1 для базиса 1 (слева) и базиса 2 (справа) в моменты времени (снизу вверх)  $t = 0.0, 0.5, 1.0$

Рис. 6.10. Схематическое представление расчетной области для Тестов 4, 5, 8 — 10.



Распределение концентрации фазы 1 в разные моменты времени показано на рисунках 6.11 слева. Результаты данного теста носят качественный характер и показывают устойчивость представленных выше вычислительных алгоритмов для задач, предполагающих наличие интенсивных ударных волн в жидкостях с существенно отличающимися свойствами. В данном тесте использовалась полная неравновесная система уравнений Баера-Нунциато без учета релаксационных слагаемых и межфазных сил, поэтому сравнение с экспериментальными данными не представляется возможным. Решение производилось с помощью разрывного метода Галеркина с алгебраическим восполнением решения первого порядка. Лимитирование осуществлялось с применением лимитера WENO-S, а также лимитера, обеспечивающего нахождение объемной доли в интервале  $(0, 1)$ .

**Тест 5.** Рассматривается задача о взаимодействии распространяющейся по жидкости ударной волны с расположенными в ней «пузырями» из газа. В результате ударная волна разделяет газ с существенно отличными свойствами. Начальные данные, параметры уравнения состояния и расчетной области совпадают с предыдущим тестом и представлены в таблице 6.3.

Распределение концентрации фазы 1 в разные моменты времени показано на рисунках 6.12 слева. Результаты данного теста носят качественный характер и показывают устойчивость представленных выше вычислительных алгоритмов для задач, предполагающих наличие интенсивных ударных волн в жидкостях с существенно отличающимися свойствами.

### 6.2.2. Тестовые расчеты с релаксацией

В данном разделе представлены тесты с учетом релаксационных процессов, численный алгоритм расчета которых описан в разделе 4.1.4. Тесты 6 и 7, предложенные в [102], соответствуют одномерным задачам Римана о распаде разрыва и прохождении ударной волны через контактную границу двух веществ при больших соотношениях

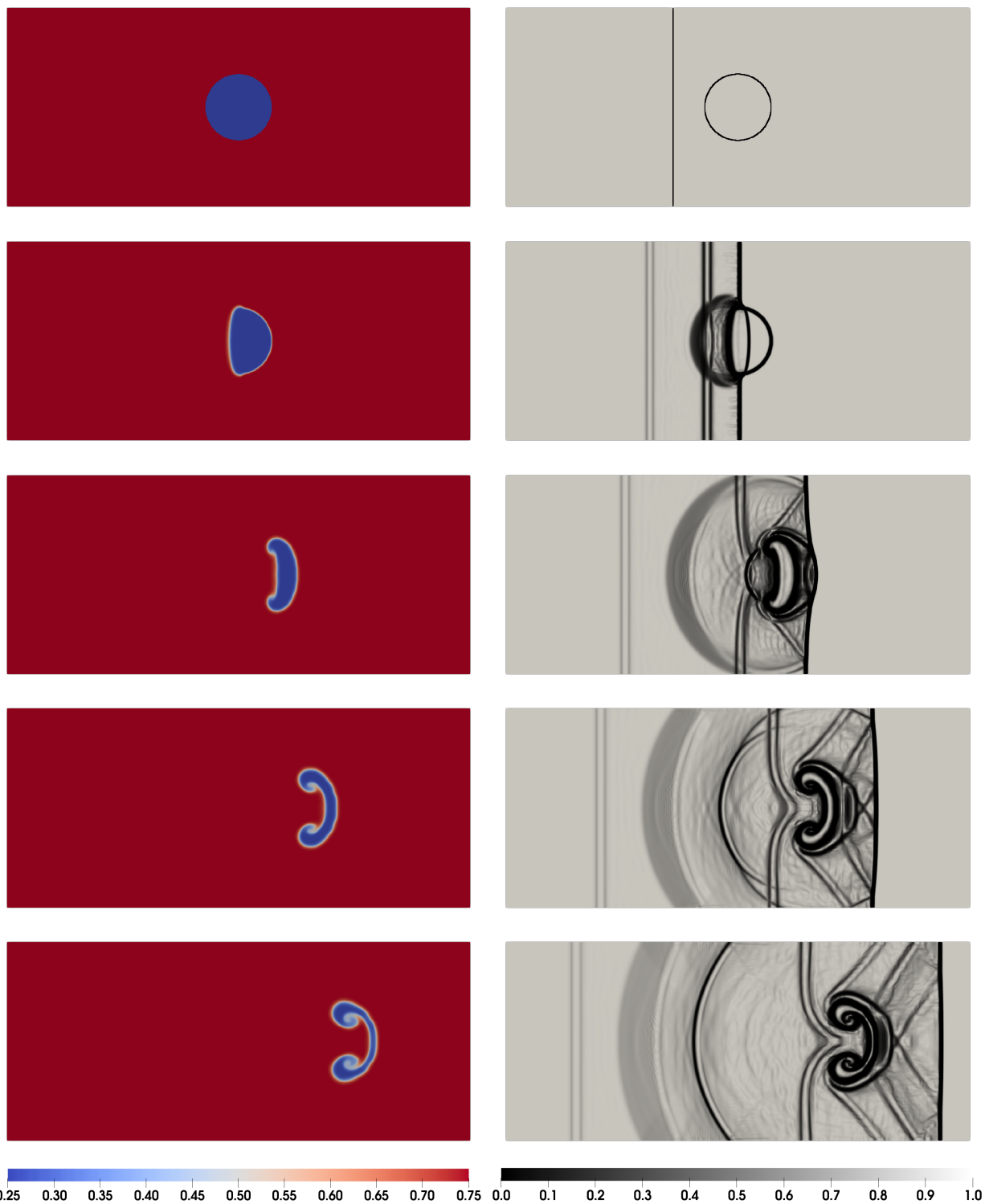


Рис. 6.11. Тест 4. Концентрация фазы 1 (слева) и ширен плотности смеси (справа) в моменты времени  $t = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ .

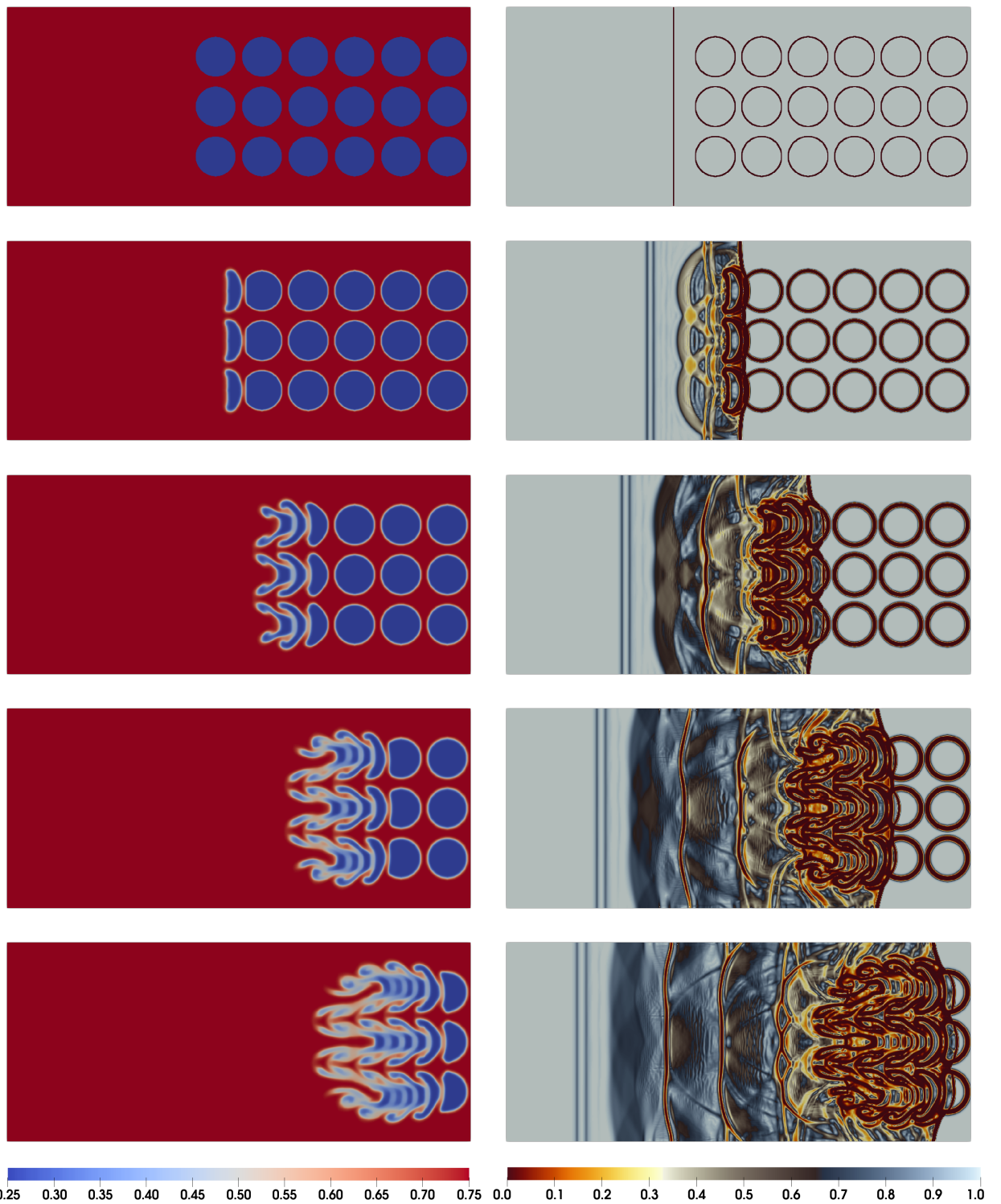


Рис. 6.12. Тест 5. Концентрация фазы 1 (слева) и ширен плотности смеси (справа) в моменты времени  $t = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ .

плотностей и разных уравнений состояния (из легкого в тяжелое). Эти тесты допускают аналитическое решение в рамках однофазных уравнений газодинамики.

Тесты 8—10 исследуют прохождение ударной волны через пузырьки криптона, азота или гелия, содержащегося в воздухе. Сравнение полученных численных расчетов проводится с экспериментальными данными [136], а также с численными расчетами, полученными другими авторами [137]. В рамках расчетов с релаксацией для решения применялся разрывный метод Галеркина с линейным алгебраическим восполнением решения, а также комплексное лимитирование на основе лимитера WENO-S, лимитера, обеспечивающего положительность объемных долей и плотностей, а также лимитера, обеспечивающего положительность давления.

**Тест 6.** Тест характеризуется тем, что распад разрыва происходит на контактной границе при больших соотношениях давлений ( $\times 1000$ ). Уравнение состояния для первой фазы соответствует воздуху, а второй — воде, и представлены в Таблице 6.5. Начальные данные представлены в Таблице 6.5. Разрыв в начальный момент времени задан в точке  $x_0$  для всех переменных (см. Таблицу 6.5). Коэффициенты релаксации оцениваются по формуле (4.23). Численные эксперименты проводились в расчетной области  $[0,1]$ .

Результаты для численных экспериментов представлены на Рис. 6.13 с  $N = 2500$  и для  $l = 0, 1$  на момент времени  $t = t^*$  (см. Таблицу 6.5). Видно, что численные результаты достаточно хорошо воспроизводят аналитическое решение, а также на кривой давления видно, что результаты с  $l = 1$  менее диссипативны чем результаты с  $l = 0$ .

Удельная внутренняя энергия  $e$ , представленная на Рис. 6.13 и 6.14, рассчитывается следующим образом:

$$e = \frac{\mathcal{U}_1 \alpha_1 \rho_1 + \mathcal{U}_2 \alpha_2 \rho_2}{\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2} \quad (6.7)$$

**Тест 7.** В данном тесте ударная волна, сформированная в первой фазе, проходит через контактный разрыв. Таким образом, в отличие от предыдущего теста, контактный разрыв и разрыв в давлении не совпадают в начальный момент времени. Задача Римана представлена для данных с начальным разрывом в точке  $x_0$  (см. Таблицу 6.5). Параметры уравнения состояния для первой фазы соответствуют параметрам воздуха, для второй фазы — железа. Начальные данные представлены в Таблице 6.5. На левой границе устанавливаются следующие краевые условия:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0.9999, & \alpha_2 &= 10^{-4}, \\ \alpha_1 \rho_1 &= 0.1249875 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, & \alpha_2 \rho_2 &= 0.000782 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \\ \alpha_1 \rho_1 u_1 &= 0.288596 \frac{\text{кг}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}}, & \alpha_2 \rho_2 u_2 &= 0.0018 \frac{\text{кг}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}}. \end{aligned}$$

Таблица 6.5. Начальные данные тестов с релаксацией

Тест	Начальные данные			Тип УС	Параметры
Тесты 1D					
	$x < x_0$		$x > x_0$		
6	$\alpha_1 = 0.9999, \alpha_2 = 0.0001,$ $\rho_1 = 1000.0, \rho_2 = 50.0,$ $u_1 = 0.0, u_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^9, P_2 = 10^9$	$\alpha_1 = 0.0001, \alpha_2 = 0.9999,$ $\rho_1 = 1000.0, \rho_2 = 50.0,$ $u_1 = 0.0, u_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^6, P_2 = 10^6$	УС (3.11)		$\gamma_1 = 4.4,$ $\pi_1 = 6.0 \cdot 10^8,$ $\gamma_2 = 1.4,$ $\pi_2 = 0.0,$ $x_0 = 0.7,$ $t_* = 2.2 \cdot 10^{-4}$
7	$\alpha_1 = 0.9999, \alpha_2 = 0.0001,$ $\rho_1 = 0.125, \rho_2 = 7.82,$ $u_1 = 0.0, u_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^{-5}, P_2 = 10^{-5}$	$\alpha_1 = 0.0001, \alpha_2 = 0.9999,$ $\rho_1 = 0.125, \rho_2 = 7.82,$ $u_1 = 0.0, u_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^{-5}, P_2 = 10^{-5}$	фаза 1: УС (3.11) фаза 2: УС (3.12)		$\gamma_1 = 1.4,$ $\pi_1 = 0,$ $\gamma_2 = 4.54777,$ $c_2^0 = 4.9,$ $n = 3,$ $\rho_2^0 = 7.82,$ $x_0 = 0.4,$ $t_* = 0.606323$
Тесты 2D					
	состояние до УВ	состояние после УВ	состояние внутри пузырька		
8 – 10	$\alpha_1 = 0.9999,$ $\alpha_2 = 0.0001,$ $\rho_1$ — см. 6.6, $\rho_2 = 1.4,$ $u_1 = 0.0,$ $u_2 = 0.0,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^5,$ $P_2 = 10^5$	$\alpha_1 = 0.9999,$ $\alpha_2 = 0.0001,$ $\rho_1$ — см. 6.6, $\rho_2 = 1.92691,$ $u_1 = -114.42,$ $u_2 = -114.42,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $P_1 = 1.0 \cdot 10^5,$ $P_2 = 156980.0$	$\alpha_1 = 0.0001,$ $\alpha_2 = 0.9999,$ $\rho_1$ — см. 6.6, $\rho_2 = 1.4,$ $u_1 = 0.0,$ $u_2 = 0.0,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^5,$ $P_2 = 10^5$		УС (3.11)
					см. 6.6 $x_{sh} = 0.252,$ $x_b = 0.18267,$ $t_* = 25 \cdot 10^{-5}$
Тесты 3D					
	состояние до УВ	состояние после УВ	состояние внутри пузырька		
11 – 13	$\alpha_1 = 0.9999,$ $\alpha_2 = 0.0001,$ $\rho_1$ — см. 6.6, $\rho_2 = 1.4,$ $u_1 = 0.0,$ $u_2 = 0.0,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $w_1 = 0.0,$ $w_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^5,$ $P_2 = 10^5$	$\alpha_1 = 0.9999,$ $\alpha_2 = 0.0001,$ $\rho_1$ — см. 6.6, $\rho_2 = 1.92691,$ $u_1 = -114.42,$ $u_2 = -114.42,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $w_1 = 0.0,$ $w_2 = 0.0,$ $P_1 = 1.0 \cdot 10^5,$ $P_2 = 156980.0$	$\alpha_1 = 0.0001,$ $\alpha_2 = 0.9999,$ $\rho_1$ — см. 6.6, $\rho_2 = 1.4,$ $u_1 = 0.0,$ $u_2 = 0.0,$ $v_1 = 0.0,$ $v_2 = 0.0,$ $w_1 = 0.0,$ $w_2 = 0.0,$ $P_1 = 10^5,$ $P_2 = 10^5$		УС (3.11)
					см. 6.6 $x_{sh} = 0.252,$ $x_b = 0.18267,$ $t_* = 25 \cdot 10^{-5}$



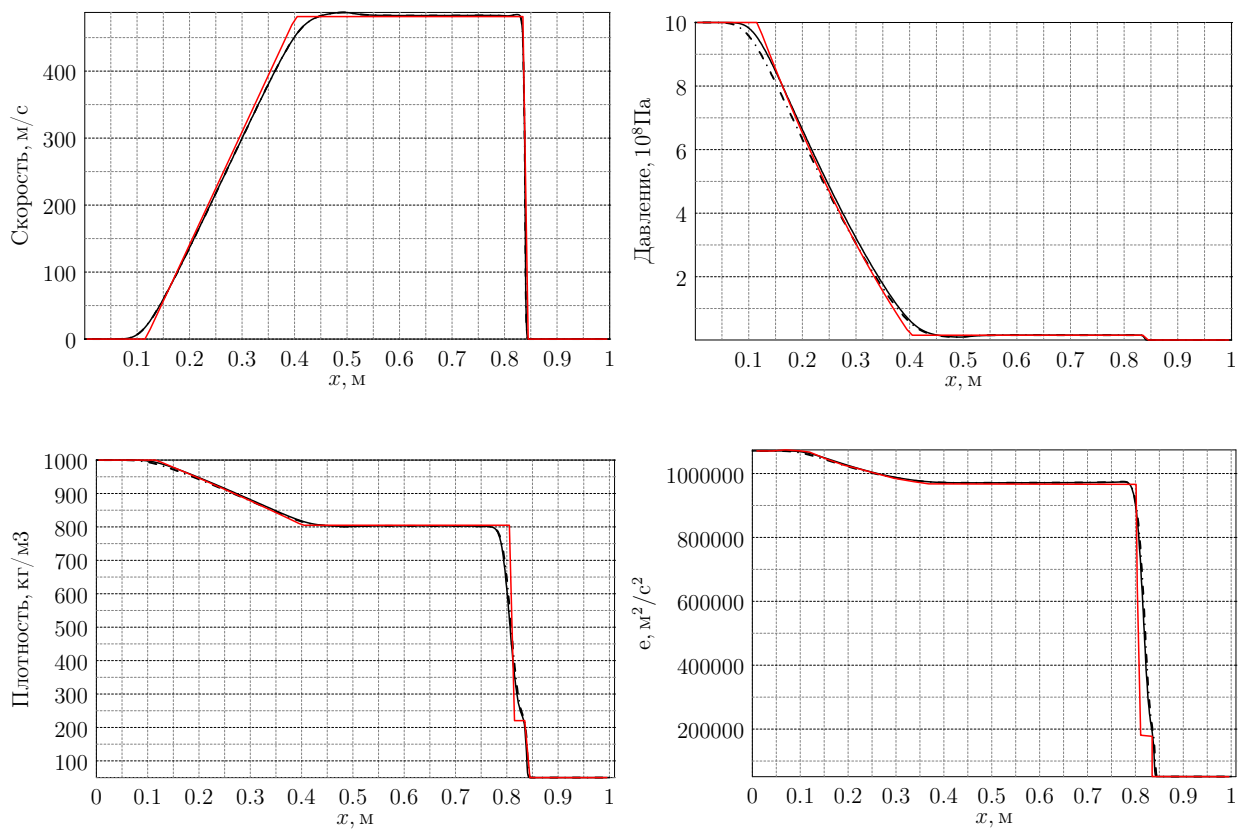


Рис. 6.13. Тест 6. Распределения для всех переменных (красная кривая — аналитическое решение, черная кривая — численный расчет с  $l = 1$ , штрихпунктирная черная кривая — численный расчет с  $l = 0$ ).

На правой границе устанавливаются условия симметрии. Численные эксперименты проводились в расчетной области  $[-1.4, 1]$ , а результаты расчетов представлены для расчетной области  $[0, 1]$ . Коэффициенты релаксации оцениваются по формуле (4.23).

Результаты численных экспериментов представлены на Рис. 6.14 на момент времени  $t = t^*$  (см. Таблицу 6.5) с  $N = 5000$  ( $l = 0, 1$ ) и  $N = 40000$  ( $l = 0$ ). Видно, что численные результаты с  $l = 1$  соответствуют решению, полученному значительно менее диссипативной схемой, чем результаты с  $l = 0$  при одном и том же разбиении на ячейки по пространству ( $N = 5000$ ). При этом на контактном разрыве и в ударной волне, распространяющейся в газе, результаты численных расчетов и аналитическое решение практически совпадают, однако амплитуда ударной волны, распространяющейся в железе, описывается плохо. Такие результаты связаны с описанием недивергентного слагаемого в численной схеме: как указывалось выше, соотношения Ренкина-Гюгиони для модели Баера-Нунциато зависят от пути, вдоль которого интегрируется недивергентное слагаемое. Таким образом, структура разрыва неявно задается с помощью введенного в численную схему пути. Более того, первое дифференциальное приближение разностной схемы будет зависеть не только от заданного пути, но и от численной вязкости. Уравнение для определения структуры разрыва, которое используется для получения аналитического решения, не совпадает с первым дифференциальным приближением численной схемы. Отметим, что такие сложности существуют для любой численной схемы, которая содержит численную вязкость.

**Тесты 8 — 10.** В данной серии экспериментов исследуется прохождение ударной волны через пузырек гелия, азота или криптона диаметра 0.4 м, находящегося в ударной трубе. Термодинамические свойства пузырька и окружающего воздуха приведены в Таблице 6.6. Начальные данные для серии тестов представлены в Таблице 6.5. Схематическое представление расчетной области представлено на Рис. 6.10. На твердых стенках устанавливаются условия симметрии. Численные эксперименты проводились на расчетной сетке:  $N_1 = 900$ ,  $N_2 = 240$ ,  $N_3 = 1$ .

Таблица 6.6. Термодинамические свойства воздуха и пузырька.

Физические свойства	Гелий	Воздух	Азот	Криптон
Плотность	0.167	1.29	1.25	3.506
Скорость звука	1007	340	367	220
Показатель адиабаты	1.67	1.4	1.67	1.67

Динамика прохождения ударной волны через пузырек зависит от числа Атвуда  $A = (\rho_b - \rho_s) / (\rho_b + \rho_s)$ , где  $\rho_b$  — плотность пузырька,  $\rho_s$  — плотность окружающей среды. После того как фронт ударной волны достигает газового пузырька, он перестает быть плоским, так как одна часть волны взаимодействует с пузырьком (в дальнейшем будем называть ее проходящей ударной волной), а другая — нет (падающая ударная волна). Если плотность газового пузырька больше, чем плотность окружающей среды ( $A > 0$ ), то ударная волна по газовому пузырьку распространяется медленнее. Соответственно,

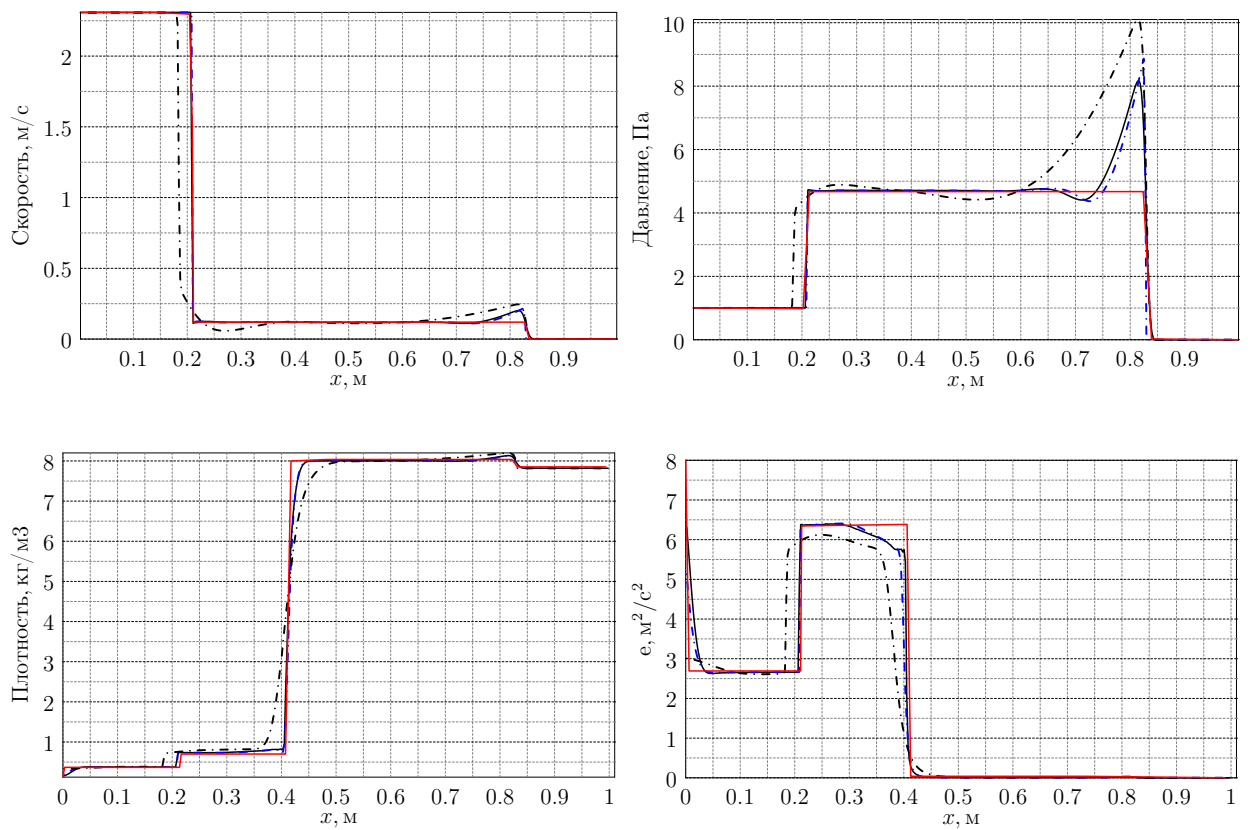


Рис. 6.14. Тест 7. Распределения для всех переменных (красная кривая — аналитическое решение, черная сплошная ( $l = 1$ ) и штрихпунктирная ( $l = 0$ ) кривые —  $N = 5000$ , синяя штрихпунктирная кривая —  $N = 4000, l = 0$ ).

если плотность газового пузырька меньше, чем плотность окружающей среды ( $A < 0$ ), то ударная волна по газовому пузырьку распространяется быстрее. Результаты численных экспериментов по скорости распространения падающей и проходящей ударной волны представлены на Рис. 6.15а (Криптон), Рис. 6.15с (Гелий) и Рис. 6.15е (Азот). Видно, что скорость проходящей ударной волны для криптона меньше, чем скорость падающей ударной волны ( $A = 0.4621$ ), выше для гелия ( $A = -0.7708$ ) и практически совпадают для азота ( $A = -0.0157$ ). Видно хорошее согласие полученных численных результатов и экспериментальных данных по скорости распространения падающей и проходящей ударной волны.

Эволюция газового пузырька исследуется путем отслеживания точек 1 и 2, связанных с межфазной границей пузырька (см. Рис. 6.10). Экспериментальные данные для точки 2 в [136] представлены только для Азота. Для обработки результатов численных расчетов по определению положения межфазной границы устанавливалось пороговое значение  $\alpha_{cr}$ . На Рис. 6.15 представлены результаты с  $\alpha_{cr} = 0.1$  и  $\alpha_{cr} = 0.3$ . Видно хорошее согласие полученных численных результатов и экспериментальных данных по описанию эволюции газового пузырька. На Рис.6.16 представлены шлиры на примере пузырька азота и криптона. На Рис. 6.16а видно, что проходящая ударная волна медленнее падающей ударной волны (случай  $A = 0.4621$ ), а при прохождении ударной волны через пузырек азота ее фронт практически не деформируется (случай  $A = -0.0157$ ).

В работе [137] также получены численные результаты для рассматриваемых постановок. Указанная работа отличается от настоящей тем, что в ней рассматривается равновесная по скорости модель [4]. На Рис. 6.15 также видно согласие полученных численных расчетов с результатами численных расчетов, полученных в работе [137].

Таким образом, представленные вычислительные алгоритмы воспроизводят расчеты, полученные в работе [137] и экспериментальные данные из [136], для задач прохождения ударной волны через пузырек.

**Тест 11.** В данной серии тестов рассматривается трехмерная постановка задачи о прохождении ударной волны через среду, содержащую включения из азота для Разрывного метода Галеркина с константным представлением решения в каждой ячейке, а также с линейным алгебраическим восполнением решения. Серия тестов соответствует двумерным тестам 8 —10. Термодинамические свойства пузырька и окружающего воздуха приведены в Таблице 6.6. Начальные данные для серии тестов представлены в Таблице 6.5. Данная серия тестов демонстрирует возможность применения указанных алгоритмов в сложных трехмерных постановках задач. В первом расчете (линейное восполнение решения) использовалась воксельная сетка размерами 600X300X300. Во втором расчете использовалась воксельная сетка размерами 400X200X200.

На рис. 6.19 представлена эволюция изменения формы пузырька для первого и второго расчетов соответственно. На рис. 6.17 представлено положение пузырька азота

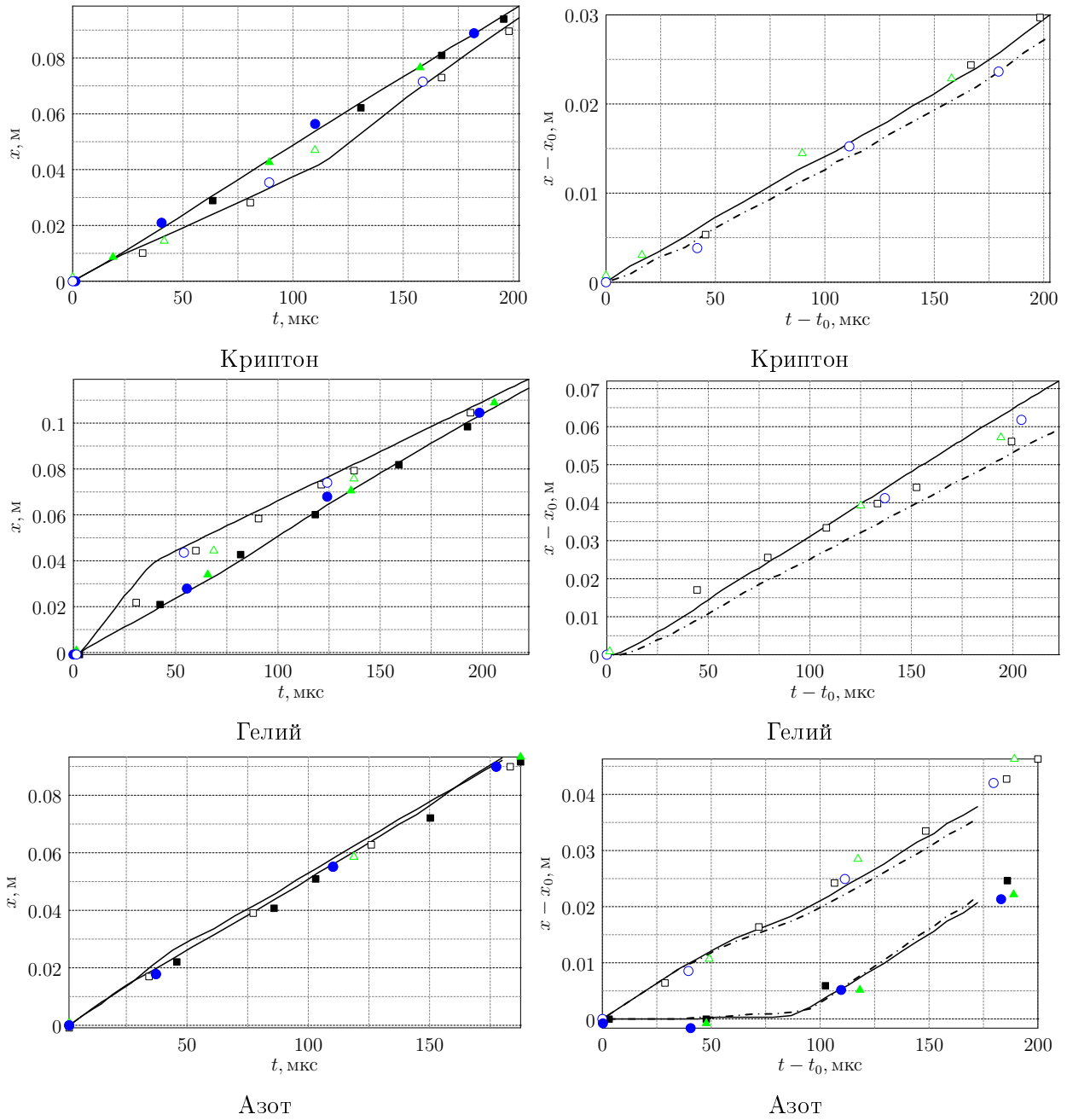


Рис. 6.15.  $X-t$  диаграммы для падающей и проходящей УВ (слева, черные сплошные кривые – численный расчет, круги и треугольники – эксперимент 1 и 2 [136], квадраты – результаты численных расчетов [137], закрашенные символы – падающая УВ, незакрашенные символы – проходящая УВ) и  $X-t$  диаграммы для точки межфазной границы (справа, черные сплошные ( $\alpha_{cr} = 0.3$ ) и штрихпунктирные ( $\alpha_{cr} = 0.1$ ) кривые – численный расчет, круги и треугольники – эксперимент 1 и 2 [136], квадраты – результаты численных расчетов [137], закрашенные символы – точка 1, незакрашенные символы – точка 2)

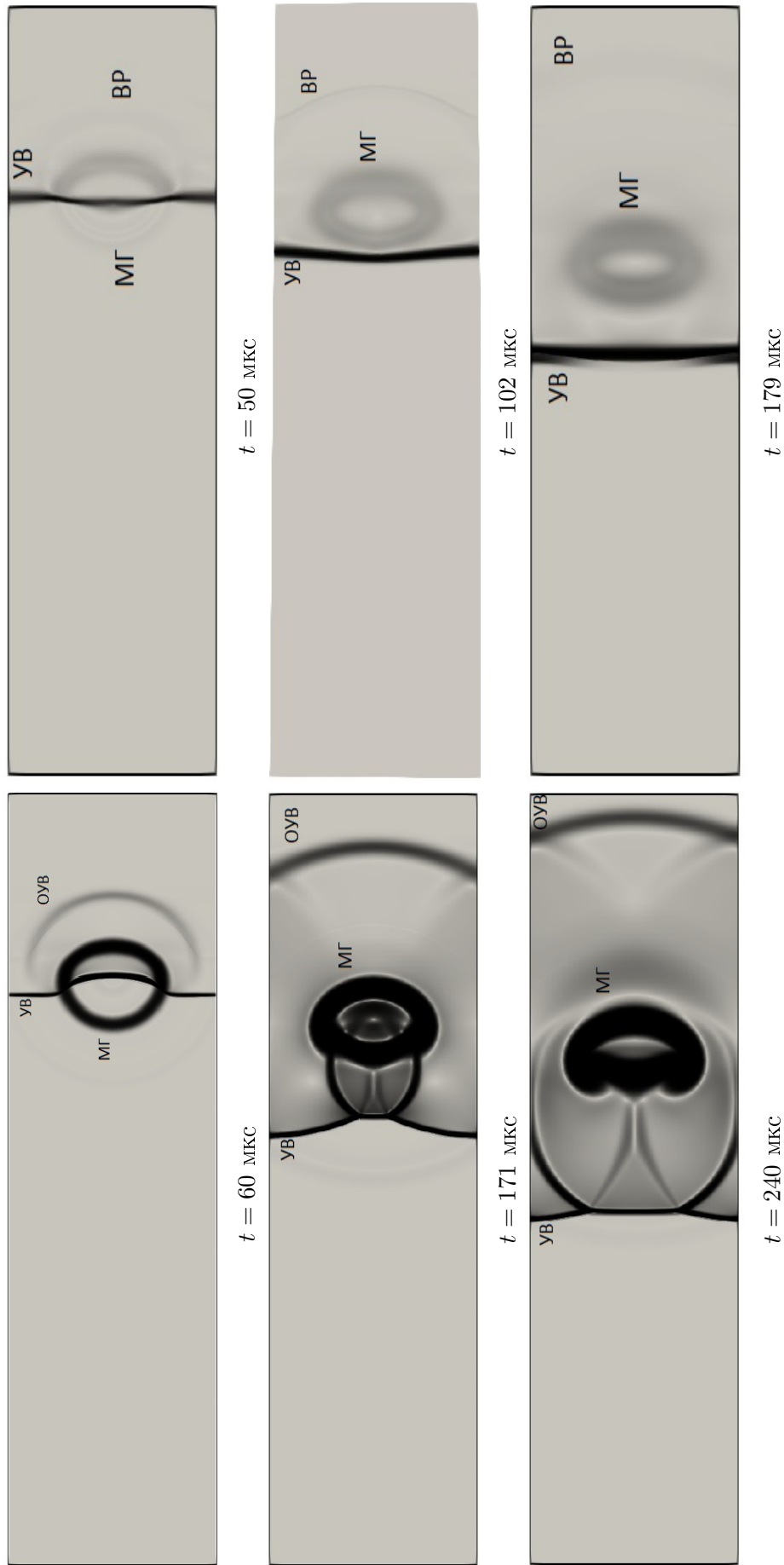


Рис. 6.16. Тесты 7 – 9: Шлирены для пузырька криптона (слева) и азота (справа) (УВ – ударная волна, МГ – межфазная граница, ОУВ – отраженная УВ, ВР – волна разрежения)

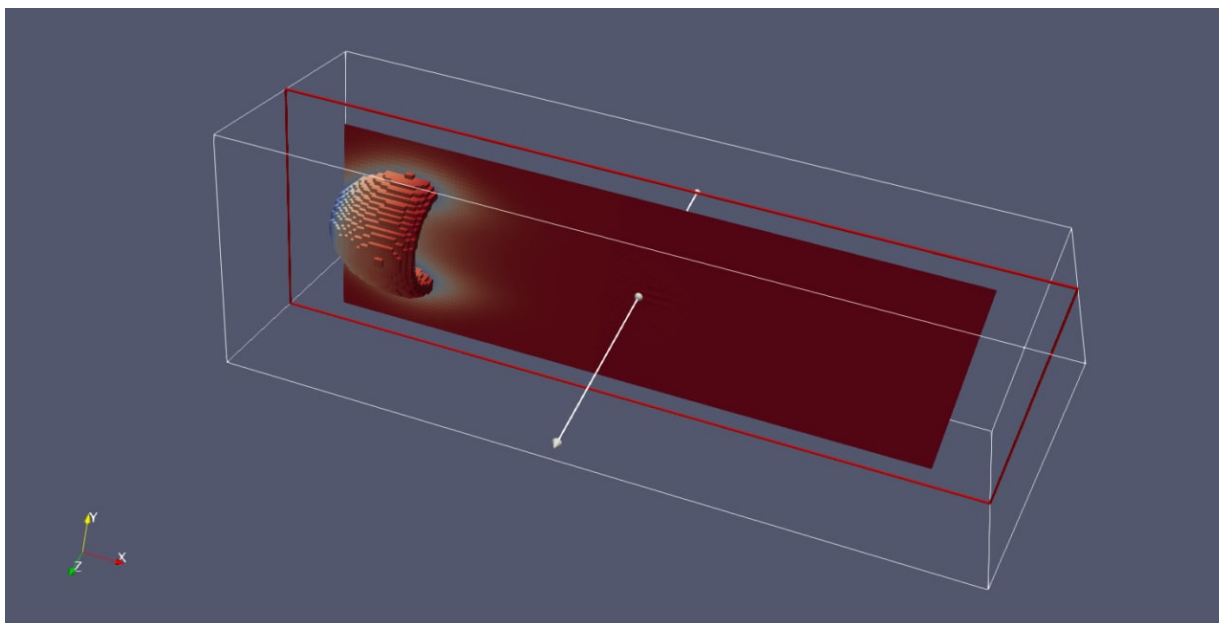
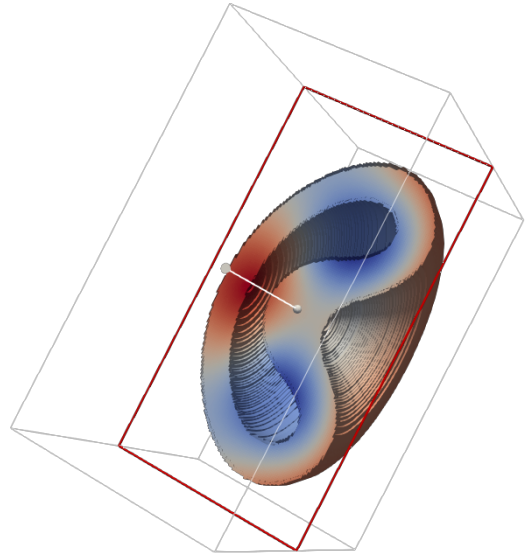
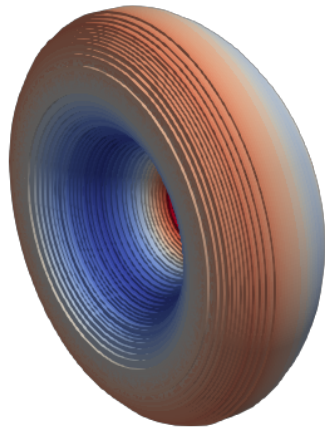


Рис. 6.17. Тест 11. Положение пузырька азота на конечный момент времени

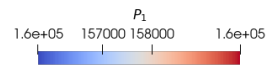
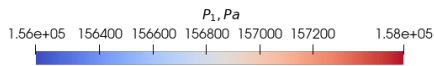
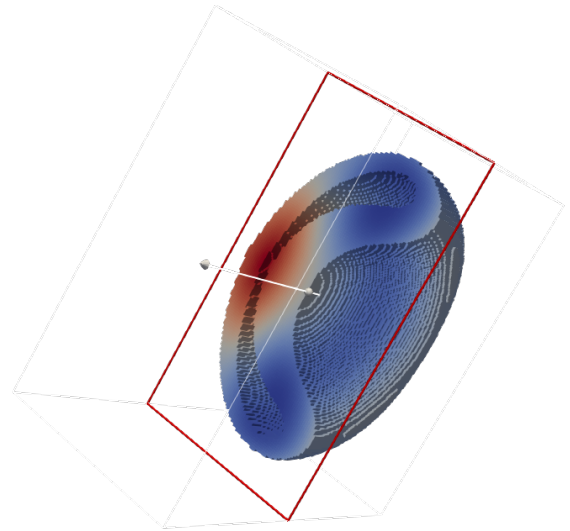
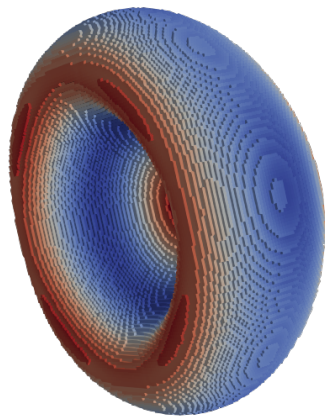
на конечный момент времени расчета, на рис. 6.18 представлено распределение давления внутри пузырька азота. Данные результаты получены с использованием разрывного метода Галеркина с алгебраическим восполнением решения первого порядка, а также с использованием метода конечных объемов для качественного сравнения результатов. Также качественное сравнение результатов расчета, полученных с помощью схем первого и второго порядков аппроксимации по пространству, представлено на рис. 6.20.

Полученные результаты свидетельствуют, что разработанный алгоритм может использоваться на сетках больших размерностей для решения вычислительно сложных задач в реалистичных постановках.



Давление в пузырьке. Решение с использованием разрывного метода Галеркина.

Давление в пузырьке в разрезе. Решение с использованием разрывного метода Галеркина.

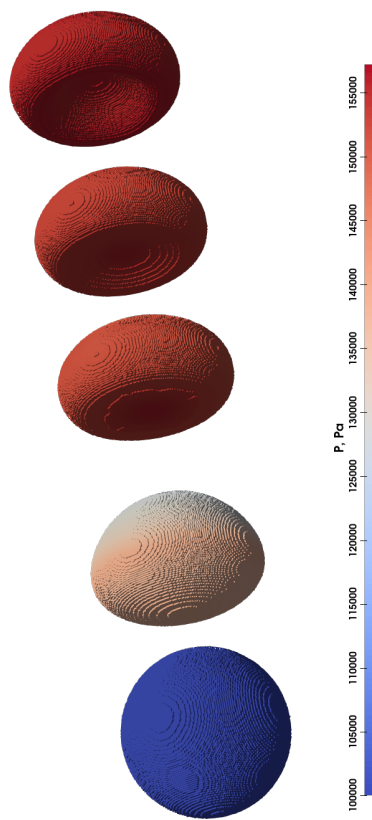


Давление в пузырьке. Решение с использованием метода конечных объемов.

Давление в пузырьке в разрезе. Решение с использованием метода конечных объемов.

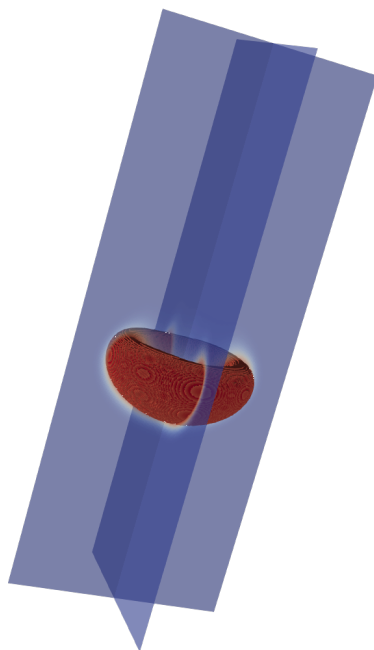
Рис. 6.18. Тест 11. Распределение поля давления в пузырьке гелия в конечный момент времени



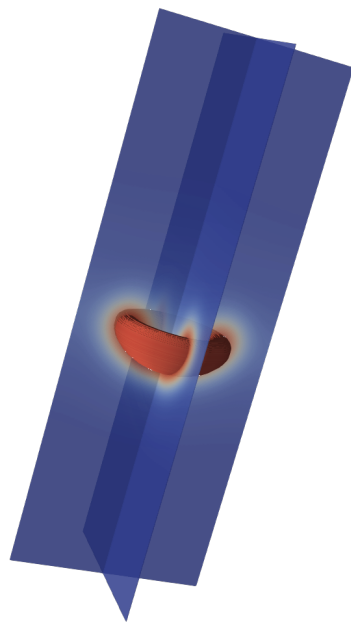


Эволюция пузырька гелия в моменты времени  $t = 0, 30, 60, 90, 120$  мкс

Рис. 6.19. Тест 11. Эволюция пузырька гелия в случае метода конечных объемов (слева) и разрывного метода Галеркина (справа)



1ый порядок



2ой порядок

Рис. 6.20. Результаты расчета для пузырька азота. Цветом показана объемная доля.

## Заключение

Данная работа посвящена математическому моделированию термомеханических процессов в многофазных средах. В качестве численной схемы используется разрывный метод Галеркина, обобщенный на случай систем с неконсервативными слагаемыми. Введено понятие обобщенного решения на случай неконсервативного слагаемого с разрывным коэффициентом. Представлены варианты численных потоков на основе метода Годунова для случая схемы с неконсервативными слагаемыми. Описаны варианты ограничителей для изложенных задач. Основными ограничителями, используемыми в данной работе, являются ограничитель Криводоновой и ограничитель, построенный на WENO-схемах.

В работе представлен вывод многофазной математической модели с учетом гиперупругого поведения фаз на основе процедуры Колмана-Нолла. Помимо этого, рассмотрены математические модели, являющиеся системами гиперболических уравнений и описывающие динамику многофазных сред. Для модели Годунова-Роменского, описывающей гиперупругие среды, представлен вариант, включающий в себя неоднородности среды. Таким образом, полученная итоговая модель гиперупругости описывает динамику неоднородных сред с явно заданной «межфазной» границей. Для моделирования многофазных сред, в которых отсутствуют сдвиговые слагаемые в тензоре напряжений, используется модель Баера-Нунциато. Программный комплекс, разработанный для применения разрывного метода Галеркина к системам гиперболических уравнений, может использоваться для широкого круга задач. В данной работе он применялся для задач гиперупругости и многофазных задач и показал гибкость в использовании и эффективность применения.

Для каждой из представленных моделей проведены численные расчеты для ряда известных тестовых задач. По результатам численных экспериментов можно сделать следующие выводы. Полученная численная схема позволяет эффективно решать модели, состоящие из гиперболических уравнений, содержащие консервативные и неконсервативные слагаемые. Полученные результаты демонстрируют ряд важных свойств представленной численной схемы. Во-первых, она может быть эффективно использована в рамках гиперупругих моделей. Во-вторых, она удовлетворяет критерию Абграля о постоянстве межфазных слагаемых. В-третьих, при достаточно малых величинах расчетных физических полей они остаются положительными. В-четвертых, данная схема позволяет устойчиво считать задачи с интенсивными ударными волнами в жидких средах.

Основными результатами диссертационной работы являются:

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

Дальнейшее развитие представленных в диссертационной работе результатов связано с:

- Обобщением предложенных в работе многофазных гиперупругих моделей с целью учета реалистичной реологии фаз, в частности, учета упруго-пластических и вязкоупругих эффектов.
- Разработкой вычислительных алгоритмов для решения уравнений гиперупругой многофазной модели и их программная реализация в рамках параллельного программного комплекса.

## Литература

- [1] Baer M., Nunziato J. Theory for deflagration-to-detonation transition (DDT) in granular explosives. — 1983.
- [2] Drew D., Passman S. Theory of multicomponent fluids. — Springer Science & Business Media, 2006. — Vol. 135.
- [3] Closure laws for a two-fluid two-pressure model / Coquel Frédéric, Gallouët Thierry, Hérard Jean-Marc, and Seguin Nicolas // *Comptes Rendus Mathématique*. — 2002. — Vol. 334, no. 10. — P. 927–932.
- [4] Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations / Kapila A., Menikoff R., Bdzil J., Son S., and Stewart D. // *Physics of Fluids*. — 2001. — Vol. 13, no. 10. — P. 3002–3024. — Access mode: <https://doi.org/10.1063/1.1398042>.
- [5] A class of two-fluid two-phase flow models / Coquel Frédéric, Hérard Jean-Marc, Saleh Khaled, and Seguin Nicolas // *42nd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit*. — 2012. — P. 3356.
- [6] Hérard Jean-Marc, Hurisse Olivier. A fractional step method to compute a class of compressible gas–liquid flows // *Computers and Fluids*. — 2012. — feb. — Vol. 55. — P. 57–69.
- [7] Müller S., Hantke M., Richter P. Closure conditions for non-equilibrium multi-component models // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. — 2015. — aug. — Vol. 28, no. 4. — P. 1157–1189.
- [8] Favrie N., Gavriluk S., Saurel R. Solid–fluid diffuse interface model in cases of extreme deformations // *Journal of Computational Physics*. — 2009. — Vol. 228, no. 16. — P. 6037–6077.
- [9] Quirk J., Karni S. On the dynamics of a shock–bubble interaction // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1996. — Vol. 318. — P. 129–163.
- [10] Hirt C., Nichols B. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // *Journal of Computational Physics*. — 1981. — Vol. 39, no. 1. — P. 201–225.

- [11] Pilliod Jr J., Puckett E. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces // *Journal of Computational Physics*. — 2004. — Vol. 199, no. 2. — P. 465–502.
- [12] Osher S., Sethian J. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations // *Journal of Computational Physics*. — 1988. — Vol. 79, no. 1. — P. 12–49.
- [13] Alekseev M., Savenkov E., Voronin F. RKDG method solution for hyperbolic hyperelastic model // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2018. — dec. — Vol. 1141. — P. 012044.
- [14] 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.
- [15] Alekseev M., Savenkov E. Numerical Simulation of Heterogeneous Hyperelastic Model with RKDG // *Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes (2018)*. — Springer, 2019. — P. 295–302.
- [16] Алексеев М. В., Савенков Е. Б. Применение разрывного метода Галеркина для решения одномерных гиперболических задач гиперупругости в неоднородной среде // *Препринты Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН*. — 2019. — № 88. — С. 20.
- [17] Alekseev M., Savenkov E. Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for hyperbolic hyperelasticity equations for inhomogeneous medium. // *Mathematica Montisnigri*. — 2020. — Vol. 47. — P. 52–64.
- [18] Алексеев М. В., Савенков Е. Б., Воронин Ф. Н. Численное решение уравнений Баера-Нунциатора разрывным методом Галеркина // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. — 2020. — no. 48. — P. 1–23.
- [19] Alekseev Mikhail, Savenkov Evgeny. 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. — apr. — Vol. 36, no. 2. — P. 57–74.
- [20] Р.Р. Тухватуллина М.В. Алексеев, Савенков Е.Б. Численное решение уравнений релаксационной модели Баера-Нунциато с помощью разрывного метода Галеркина // *Дифференциальные уравнения*. — 2021. — Vol. 57, no. 7. — P. 988–1002.
- [21] Алексеев М.В., Савенков Е.Б. Математическая модель двухфазной гиперупругой среды. «Скалярный» случай // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. — 2022. — no. 40. — P. 1–63.

- [22] Р.Р. Полехина М.В. Алексеев, Савенков Е.Б. Валидация вычислительного алгоритма на основе разрывного метода Галеркина для релаксационной модели Баера-Нунциато // Дифференциальные уравнения. — 2022. — Vol. 58, no. 7. — P. 977–994.
- [23] Алексеев М. В. Численное моделирование двухфазных течений в рамках релаксационной модели Баера-Нунциато // Вычислительные методы и программирование. — 2023. — май. — Vol. 24. — P. 182–194. — Access mode: <https://num-meth.ru/index.php/journal/article/view/1285>.
- [24] 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.
- [25] Alegria - Sandia National Laboratories : 2019(1 декабря 2019 г.). — [http://www.cs.sandia.gov/ALEGRA/Alegria\\_Home.html](http://www.cs.sandia.gov/ALEGRA/Alegria_Home.html).
- [26] BLAST - Computing - LLNL : 2019(1 декабря 2019 г.). — <https://computation.llnl.gov/projects/blast>.
- [27] A Radiation-Hydrodynamics Code Comparison for Laser-Produced Plasmas: FLASH versus HYDRA and the Results of Validation Experiments / Orban Chris, Fatenejad Milad, Chawla Sugreev, Wilks Scott, and Lamb Don. — 2013. — 06.
- [28] LASNEX code for inertial confinement fusion : Rep. / California Univ. ; executor: Zimmerman G, Kershaw D, Bailey D, Harte J : 1977.
- [29] LASNEX—A 2-D physics code for modeling ICF / Harte JA, Alley WE, Bailey DS, Eddleman JL, and Zimmerman GB // Foreword iii WARP3d, a Three-Dimensional PIC Code for High-Current. — 1996. — Vol. 129.
- [30] The radiation-hydrodynamic ICF3D code / Shestakov AI, Prasad MK, Milovich JL, Gentile NA, Painter JF, and Furnish G // Computer methods in applied mechanics and engineering. — 2000. — Vol. 187, no. 1-2. — P. 181–200.
- [31] Mosso S., Garasi C., Drake R. A smoothed two-and three-dimensional interface reconstruction method // Computing and visualization in science. — 2009. — Vol. 12, no. 7. — P. 365–381.
- [32] Algorithm developments in alegria guided by testing. : Rep. / Sandia National Lab.(SNL-NM), Albuquerque, NM (United States) ; executor: Rider William J, Robinson Allen C, Weirs V Gregory et al. : 2007.
- [33] Consequences for scalability arising from multi-material modeling. : Rep. / Sandia National Lab.(SNL-NM), Albuquerque, NM (United States) ; executor: Robinson Allen C : 2007.

- [34] ALEGRA: An arbitrary Lagrangian-Eulerian multimaterial, multiphysics code / Robinson Allen, Brunner Thomas, Carroll Susan, Drake Richard, Garasi Christopher, Gardiner Thomas, Haill Thomas, Hanshaw Heath, Hensinger David, Labreche Duane, et al. // 46th aiaa aerospace sciences meeting and exhibit. — 2008. — P. 1235.
- [35] Algorithmic properties of the midpoint predictor-corrector time integrator. : Rep. / Sandia National Laboratories (SNL), Albuquerque, NM, and Livermore, CA ; executor: Rider William J, Love Edward, Scovazzi Guglielmo : 2009.
- [36] Abgrall Rémi. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: a quasi conservative approach // Journal of Computational Physics. — 1996. — Vol. 125, no. 1. — P. 150–160.
- [37] Miller GH, Colella P. A high-order Eulerian Godunov method for elastic–plastic flow in solids // Journal of computational physics. — 2001. — Vol. 167, no. 1. — P. 131–176.
- [38] Miller GH, Colella P. A conservative three-dimensional Eulerian method for coupled solid–fluid shock capturing // Journal of Computational Physics. — 2002. — Vol. 183, no. 1. — P. 26–82.
- [39] Saurel R., Petitpas F., Berry R. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures // Journal of Computational Physics. — 2009. — Vol. 228, no. 5. — P. 1678–1712.
- [40] Favrie N., Gavriluk S. Diffuse interface model for compressible fluid–compressible elastic–plastic solid interaction // Journal of Computational Physics. — 2012. — Vol. 231, no. 7. — P. 2695–2723.
- [41] Ndanou S., Favrie N., Gavriluk S. Multi-solid and multi-fluid diffuse interface model: Applications to dynamic fracture and fragmentation // Journal of Computational Physics. — 2015. — aug. — Vol. 295. — P. 523–555.
- [42] Berger Marsha J, Olinger Joseph. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations // Journal of Computational Physics. — 1984. — mar. — Vol. 53, no. 3. — P. 484–512.
- [43] High performance CPU/GPU multiresolution Poisson solver / Van Rees Wim M, Rossinelli Diego, Hadjidoukas Panagiotis, and Koumoutsakos Petros // Parallel Computing: Accelerating Computational Science and Engineering (CSE). — IOS Press, 2014. — P. 481–490.
- [44] Brackbill J.U, Kothe D.B, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension // Journal of Computational Physics. — 1992. — jun. — Vol. 100, no. 2. — P. 335–354.



- [45] Kondaurov VI. Thermomechanics of phase transitions of the first order in solids // Russian Journal of Earth Sciences. — 2002. — Vol. 4, no. 2. — P. 85–102.
- [46] Годунов С., Роменский Е. Элементы механики сплошных сред и законы сохранения. — Науч. кн. Новосибирск, 1998.
- [47] Truesdell C. Rational Thermodynamics. — Springer New York, 2012. — 578 p. — ISBN: 9781461252061. — Access mode: [https://www.ebook.de/de/product/25265024/c\\_truesdell\\_rational\\_thermodynamics.html](https://www.ebook.de/de/product/25265024/c_truesdell_rational_thermodynamics.html).
- [48] Mauri Roberto. Non-equilibrium thermodynamics in multiphase flows. — Springer Science & Business Media, 2012.
- [49] Maitre E. Review of numerical methods for free interfaces // Les Houches. — 2006. — Vol. 27. — P. 31.
- [50] Chiodi Robert, Desjardins Olivier. A reformulation of the conservative level set reinitialization equation for accurate and robust simulation of complex multiphase flows // Journal of Computational Physics. — 2017. — Vol. 343. — P. 186–200.
- [51] Aniszewski W., Ménard T., Marek M. Volume of Fluid (VOF) type advection methods in two-phase flow: A comparative study // Computers and fluids. — 2014. — jun. — Vol. 97. — P. 52–73.
- [52] Fedkiw Stanley Osher Ronald, Osher Stanley. Level set methods and dynamic implicit surfaces // Surfaces. — 2002. — Vol. 44, no. 77. — P. 685.
- [53] Adalsteinsson David, Sethian James A. A fast level set method for propagating interfaces // Journal of computational physics. — 1995. — Vol. 118, no. 2. — P. 269–277.
- [54] Sussman Mark, Smereka Peter, Osher Stanley. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow // Journal of Computational physics. — 1994. — Vol. 114, no. 1. — P. 146–159.
- [55] Braeunig J., Desjardins B., Ghidaglia J. A totally Eulerian cell centered Finite Volume solver for multi-material fluid flows. — 2008.
- [56] Braeunig J., Desjardins B., Ghidaglia J. A totally Eulerian finite volume solver for multi-material fluid flows // European Journal of Mechanics-B/Fluids. — 2009. — Vol. 28, no. 4. — P. 475–485.
- [57] Loubère R., Braeunig J., Ghidaglia J. A totally Eulerian Finite Volume solver for multi-material fluid flows: Enhanced Natural Interface Positioning (ENIP) // European Journal of Mechanics-B/Fluids. — 2012. — Vol. 31. — P. 1–11.

- [58] Exact and approximate solutions of Riemann problems in non-linear elasticity / Barton P., Drikakis D., Romenski E., and Titarev V. // *Journal of Computational Physics*. — 2009. — Vol. 228, no. 18. — P. 7046–7068.
- [59] Barton Philip Trevor, Drikakis Dimitris, Romenski EI. An Eulerian finite-volume scheme for large elastoplastic deformations in solids // *International journal for numerical methods in engineering*. — 2010. — Vol. 81, no. 4. — P. 453–484.
- [60] Barton P. An Eulerian method for finite deformation anisotropic damage with application to high strain-rate problems // *International Journal of Plasticity*. — 2016. — Vol. 83. — P. 225–251.
- [61] A simple Cartesian scheme for compressible multimaterials / Gorsse Y., Iollo A., Milcent T. and Telib H. // *Journal of Computational Physics*. — 2014. — Vol. 272. — P. 772–798.
- [62] Michael L., Nikiforakis N. A multi-physics methodology for the simulation of reactive flow and elastoplastic structural response // *Journal of Computational Physics*. — 2018. — Vol. 367. — P. 1–27.
- [63] Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. — Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит.
- [64] Рахматулин Х. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред // *Прикладная математика и механика*. — 1956. — Т. 20, № 2. — С. 184–195.
- [65] Perigaud G., Saurel R. A compressible flow model with capillary effects // *Journal of Computational Physics*. — 2005. — Vol. 209, no. 1. — P. 139–178.
- [66] Нигматулин Р. И. Механика сплошной среды. — М. : ГЭОТАР-Медиа, 2014.
- [67] Two-phase modeling of DDT: Structure of the velocity-relaxation zone / Kapila A., Son S., Bdzil J., Menikoff R., and Stewart D. // *Physics of Fluids*. — 1997. — Vol. 9, no. 12. — P. 3885–3897.
- [68] Murrone A., Guillard H. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems // *Journal of Computational Physics*. — 2005. — Vol. 202, no. 2. — P. 664–698.
- [69] Abgrall R., Saurel R. Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures // *Journal of Computational Physics*. — 2003. — Vol. 186, no. 2. — P. 361–396.
- [70] 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, no. 05. — P. 663–700.

- [71] Ambroso A., Chalons C., Raviart P. A Godunov-type method for the seven-equation model of compressible two-phase flow // *Computers & Fluids*. — 2012. — Vol. 54. — P. 67–91.
- [72] Progress in the development of compressible, multiphase flow modeling capability for nuclear reactor flow applications : Rep. / Idaho National Laboratory (INL) ; executor: Berry R., Saurel R., Petitpas F. et al. : 2008.
- [73] Роменский Евгений Игоревич. Термодинамически согласованная система законов сохранения течения сжимаемой жидкости в пористой упругой среде // *Сибирский журнал индустриальной математики*. — 2011. — Т. 14, № 4. — С. 86–97.
- [74] Evaluation of an Eulerian multi-material mixture formulation based on a single inverse deformation gradient tensor field / Ghaisas N., Subramaniam A., Lele S., and Cook A. // *Center for Turbulence Research Annual Briefs*. — 2017. — Vol. 2017, no. LLNL-JRNL-741479.
- [75] Subramaniam A., Ghaisas N., Lele S. High-Order Eulerian Simulations of Multimaterial Elastic–Plastic Flow // *Journal of Fluids Engineering*. — 2018. — Vol. 140, no. 5.
- [76] Coleman Bernard D, Noll Walter. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity // *The foundations of mechanics and thermodynamics*. — Springer, 1974. — P. 145–156.
- [77] Truesdell Clifford. The mechanical foundations of elasticity and fluid dynamics // *Journal of Rational Mechanics and Analysis*. — 1952. — Vol. 1. — P. 125–300.
- [78] Noll Walter. A mathematical theory of the mechanical behavior of continuous media // *The Foundations of Mechanics and Thermodynamics*. — Springer, 1974. — P. 1–30.
- [79] Bedford A, Drumheller Do S. Theories of immiscible and structured mixtures // *International Journal of Engineering Science*. — 1983. — Vol. 21, no. 8. — P. 863–960.
- [80] Ghaisas Niranjana S., Subramaniam Akshay, Lele Sanjiva K. High-Order Eulerian Methods for Elastic-Plastic Flow in Solids and Coupling with Fluid Flows // *46th AIAA Fluid Dynamics Conference*. — American Institute of Aeronautics and Astronautics. — 2016. — jun.
- [81] Drumheller DS. On theories for reacting immiscible mixtures // *International journal of engineering science*. — 2000. — Vol. 38, no. 3. — P. 347–382.
- [82] Schumacher Shane C, Baer Melvin R. Generalized continuum mixture theory for multi-material shock physics // *International Journal of Multiphase Flow*. — 2021. — Vol. 144. — P. 103790.

- [83] Годунов Сергей Константинович. Интересный класс квазилинейных систем // Доклады Академии наук / Российская академия наук. — 1961. — Vol. 139. — P. 521–523.
- [84] Romensky E.I. Hyperbolic systems of thermodynamically compatible conservation laws in continuum mechanics // Mathematical and Computer Modelling. — 1998. — nov. — Vol. 28, no. 10. — P. 115–130.
- [85] Continuum mechanics and thermodynamics in the Hamilton and the Godunov-type formulations / Peshkov Ilya, Pavelka Michal, Romenski Evgeniy, and Grmela Miroslav // Continuum Mechanics and Thermodynamics. — 2018. — jan. — Vol. 30, no. 6. — P. 1343–1378.
- [86] Gavrilyuk Sergey. Multiphase flow modeling via Hamilton’s principle // Variational models and methods in solid and fluid mechanics. — Springer, 2011. — P. 163–210.
- [87] Блохин А. М., Доровский В. Н. Проблемы математического моделирования в теории многоскоростного континуума. — РАН, Сиб. отд-ние, Объед. ин-т геологии, геофизики и минералогии, Ин-т математики, Новосибирск, 1994.
- [88] Дмитриенко Ю. И. Нелинейная механика сплошной среды. — М. : Физматлит, 2009.
- [89] Noll Walter, Truesdell C. The Non-Linear Field Theories of Mechanics. — Springer Berlin Heidelberg, 2013. — 602 p. — ISBN: 9783662103883. — Access mode: [https://www.ebook.de/de/product/33543395/walter\\_noll\\_c\\_truesdell\\_the\\_non\\_linear\\_field\\_theories\\_of\\_mechanics.html](https://www.ebook.de/de/product/33543395/walter_noll_c_truesdell_the_non_linear_field_theories_of_mechanics.html).
- [90] Zheng Q.-S. Theory of Representations for Tensor Functions—A Unified Invariant Approach to Constitutive Equations // Applied Mechanics Reviews. — 1994. — nov. — Vol. 47, no. 11. — P. 545–587.
- [91] Hantke M, Müller S, Grabowsky L. News on Baer-Nunziato-type model at pressure equilibrium // Continuum Mechanics and Thermodynamics. — 2021. — Vol. 33, no. 3. — P. 767–788.
- [92] Hurisse Olivier. Various choices of source terms for a class of two-fluid two-velocity models // ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis. — 2021. — mar. — Vol. 55, no. 2. — P. 357–380.
- [93] Perrier Vincent, Gutiérrez Enrique. Derivation and Closure of Baer and Nunziato Type Multiphase Models by Averaging a Simple Stochastic Model // Multiscale Modeling Simulation. — 2021. — jan. — Vol. 19, no. 1. — P. 401–439.
- [94] Hérard Jean-Marc. A three-phase flow model // Mathematical and Computer Modelling. — 2007. — mar. — Vol. 45, no. 5-6. — P. 732–755.

- [95] Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: A critical examination of modeling issues / Bdzil J. B., Menikoff R., Son S. F., Kapila A. K., and Stewart D. S. // *Physics of Fluids*. — 1999. — Vol. 11, no. 2. — P. 378–402. — <https://doi.org/10.1063/1.869887>.
- [96] Годунов С., Роменский Е. Нестационарные уравнения нелинейной теории упругости в эйлеровых координатах // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* — 1972. — Т. 13, № 6. — С. 868–884.
- [97] Miller G. Minimal rotationally invariant bases for hyperelasticity // *SIAM Journal on Applied Mathematics*. — 2004. — Vol. 64, no. 6. — P. 2050–2075.
- [98] Gavriluk S.L., Favrie N., Saurel R. Modelling wave dynamics of compressible elastic materials // *Journal of Computational Physics*. — 2008. — Vol. 227, no. 5. — P. 2941–2969. — Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999107005220>.
- [99] Andrianov N., Warnecke G. The Riemann problem for the Baer–Nunziato two-phase flow model // *Journal of Computational Physics*. — 2004. — Vol. 195, no. 2. — P. 434–464.
- [100] Daude F., Berry R., Galon P. A Finite-Volume method for compressible non-equilibrium two-phase flows in networks of elastic pipelines using the Baer–Nunziato model // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 2019. — Vol. 354. — P. 820–849.
- [101] Saurel R., Abgrall R. A simple method for compressible multifluid flows // *SIAM Journal on Scientific Computing*. — 1999. — Vol. 21, no. 3. — P. 1115–1145.
- [102] Янилкин Ю.В. Тесты для гидрокодов, моделирующих ударноволновые течения в многокомпонентных средах. В 2 томах. Т.1. Газодинамика : учебное пособие. — Саров : Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ, 2017. — ISBN: 978-5-9515-0352-7.
- [103] Liu X.-D., Osher S., Chan T. Weighted essentially non-oscillatory schemes // *Journal of computational physics*. — 1994. — Vol. 115, no. 1. — P. 200–212.
- [104] Jiang G.-S. Efficient implementation of weighted ENO schemes. — Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1995.
- [105] Cockburn B., Shu C.-W. The Runge-Kutta local projection-discontinuous-Galerkin finite element method for scalar conservation laws // *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*. — 1991. — Vol. 25, no. 3. — P. 337–361.

- [106] Cockburn B., Shu C.-W. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws. II. General framework // *Mathematics of computation*. — 1989. — Vol. 52, no. 186. — P. 411–435.
- [107] Cockburn B. and Lin S. Yi., Shu C.-W. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for conservation laws. III. One-dimensional systems // *J. Comput. Phys.* — 1989. — Vol. 84, no. 1. — P. 90–113.
- [108] Yan Jue, Shu Chi-Wang. Local Discontinuous Galerkin Methods for Partial Differential Equations with Higher Order Derivatives // *Journal of Scientific Computing*. — 2002. — 01. — Vol. 17. — P. 27–47.
- [109] Colombeau Jean-François. Multiplication of distributions // *Bulletin of the american mathematical society*. — 1990. — Vol. 23, no. 2. — P. 251–268.
- [110] Cauret Jean-Jacques, Colombeau Jean-François, Le Roux AY. Discontinuous generalized solutions of nonlinear nonconservative hyperbolic equations // *Journal of mathematical analysis and applications*. — 1989. — Vol. 139, no. 2. — P. 552–573.
- [111] Alouges François, Merlet Benoit. Approximate shock curves for non-conservative hyperbolic systems in one space dimension // *Journal of Hyperbolic Differential Equations*. — 2004. — Vol. 1, no. 04. — P. 769–788.
- [112] Chalmers Noel, Lorin Emmanuel. On the numerical approximation of one-dimensional nonconservative hyperbolic systems // *Journal of Computational Science*. — 2013. — Vol. 4, no. 1-2. — P. 111–124.
- [113] Dal Maso G., Lefloch P., Murat F. Definition and weak stability of nonconservative products // *Journal de mathématiques pures et appliquées*. — 1995. — Vol. 74, no. 6. — P. 483–548.
- [114] Parés C. Numerical methods for nonconservative hyperbolic systems: a theoretical framework. // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. — 2006. — Vol. 44, no. 1. — P. 300–321.
- [115] Dumbser Michael, Balsara Dinshaw. A new efficient formulation of the HLLEM Riemann solver for general conservative and non-conservative hyperbolic systems // *Journal of Computational Physics*. — 2016. — 01. — Vol. 304. — P. 275–319.
- [116] Wanner Gerhard. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений: Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. — Mir, 1999.
- [117] A comparison of artificial viscosity, limiters, and filters, for high order discontinuous Galerkin solutions in nonlinear settings / Michoski C., Dawson C., Kubatko E., Wirasaet D., Brus S., and Westerink J. // *Journal of Scientific Computing*. — 2016. — Vol. 66, no. 1. — P. 406–434.

- [118] Persson P.-O. and Peraire J. Sub-cell shock capturing for discontinuous Galerkin methods // 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. — 2006. — P. 112.
- [119] Diffusion-based limiters for discontinuous galerkin methods-part I: one-dimensional equations / Moura R., Affonso R., da Silva A., and Ortega M. // 22nd International Congress of Mechanical Engineering. — 2013. — P. 3–7.
- [120] Zhong X., Shu C.-W. A simple weighted essentially nonoscillatory limiter for Runge–Kutta discontinuous Galerkin methods // Journal of Computational Physics. — 2013. — Vol. 232, no. 1. — P. 397–415.
- [121] Krivodonova L. Limiters for high-order discontinuous Galerkin methods // Journal of Computational Physics. — 2007. — Vol. 226, no. 1. — P. 879–896.
- [122] Rhebergen S., Bokhove O., van der Vegt J. Discontinuous Galerkin finite element methods for hyperbolic nonconservative partial differential equations // Journal of Computational Physics. — 2008. — Vol. 227, no. 3. — P. 1887–1922.
- [123] Harten Ami. ENO schemes with subcell resolution // Journal of Computational Physics. — 1989. — Vol. 83, no. 1. — P. 148–184. — Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002199918990226X>.
- [124] Shock detection and limiting with discontinuous Galerkin methods for hyperbolic conservation laws / Krivodonova L., Xin J., Remacle J.-F., Chevaugeon N., and Flaherty J.E. // Applied Numerical Mathematics. — 2004. — Vol. 48, no. 3. — P. 323–338. — Workshop on Innovative Time Integrators for PDEs. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927403001831>.
- [125] Graham Richard L., Woodall Timothy S., Squyres Jeffrey M. Open MPI: A Flexible High Performance MPI // Parallel Processing and Applied Mathematics / ed. by Wyrzykowski Roman, Dongarra Jack, Meyer Norbert, Waśniewski Jerzy. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg. — 2006. — P. 228–239.
- [126] Karypis George, Kumar Vipin. A Fast and High Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs // Siam Journal on Scientific Computing. — 1999. — 01. — Vol. 20. — P. 359–392.
- [127] Ierusalimschy Roberto, de Figueiredo Luiz Henrique, Filho Waldemar Celes. Lua - An Extensible Extension Language // Software: Practice and Experience. — 1996. — Vol. 26, no. 6. — P. 635–652.
- [128] Schroeder Will, Martin Ken, Lorensen Bill. The Visualization Toolkit. — Kitware, 2006.
- [129] BOOST C++ Libraries : 2019 (1 декабря 2019 г.). — <https://www.boost.org/>.
- [130] EIGEN : 2020 (1 января 2020 г.). — [http://eigen.tuxfamily.org/index.php?title=Main\\_Page](http://eigen.tuxfamily.org/index.php?title=Main_Page).

- [131] STAN Math Library : 2020 (1 января 2020 г.). — <https://github.com/stan-dev/math>.
- [132] Toro E. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction. — Springer Science & Business Media, 2013.
- [133] Upwind methods for the Baer–Nunziato equations and higher-order reconstruction using artificial viscosity / Fraysse F., Redondo C., Rubio G., and Valero E. // Journal of Computational Physics. — 2016. — Vol. 326. — P. 805–827.
- [134] Franquet E., Perrier V. Runge-Kutta discontinuous Galerkin method for the approximation of Baer and Nunziato type multiphase models // Journal of Computational Physics. — 2012. — 06. — Vol. 231. — P. 4096–4141.
- [135] Dumbser Michael, Hidalgo Arturo, Zanotti Olindo. High order space–time adaptive ADER-WENO finite volume schemes for non-conservative hyperbolic systems // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2014. — Vol. 268. — P. 359–387. — Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782513002491>.
- [136] Layes G, Le Métayer O. Quantitative numerical and experimental studies of the shock accelerated heterogeneous bubbles motion // Physics of Fluids. — 2007. — Vol. 19, no. 4. — P. 042105.
- [137] Nowakowski AF, Ballil A, Nicolleau FCGA. Passage of a shock wave through inhomogeneous media and its impact on gas-bubble deformation // Physical Review E. — 2015. — Vol. 92, no. 2. — P. 023028.