

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

На правах рукописи

Быковская Елена Николаевна

**Метод динамической адаптации в численном решении уравнений Бюргерса
и Кортевега - де -Вриза и математическом моделировании процессов
лазерной фрагментации металлов**

Специальность 1.2.2 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
Мажукин Владимир Иванович

Москва — 2025

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.	9
ГЛАВА 2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КАЧЕСТВА ДВУХ-И ТРЕХСЛОЙНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ БЮРГЕРСА НА ЭЙЛЕРОВОЙ И ПОДВИЖНОЙ СЕТКАХ.....	18
2.1. Введение	18
2.2. Постановка задачи на эйлеровой сетке	21
2.3. Однопараметрические семейства двух- и трехслойных разностных схем второго порядка аппроксимации, $O\Delta t^2 + h^2$ на эйлеровой сетке.	22
2.4. Алгоритм численного решения и сравнение результатов расчетов на двухслойных и трехслойных схемах на сетках с фиксированными узлами	25
2.5. Разработка трёхслойной разностной схемы на сетках с динамической адаптацией.....	29
2.6. Двухслойные и трехслойные разностные схемы на сетке с динамической адаптацией... 32	
2.7. Дифференциальное приближение разностных схем.....	34
2.8. Аналитическое решение	36
2.9. Анализ и сравнение результатов расчетов на динамической сетке с применением двух- и трехслойных схем.....	38
2.10. Заключение.....	41
ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ КОРТЕВЕГА-ДЕ ВРИЗА НА СТАЦИОНАРНОЙ И ПОДВИЖНОЙ СЕТКЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДВУХСЛОЙНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ.....	43
3.1. Введение	43
3.2. Постановка задачи	43
3.3. Конечно-разностное представление уравнения КдВ на эйлеровой сетке.....	44
3.4. Численное решение уравнения КдВ на эйлеровой сетке с использованием двухслойных разностных схем.	46
3.5. Аналитическое исследование.....	49
3.6. Разностная аппроксимация уравнения КдВ в подвижной системе координат	52
3.7. Вычислительный эксперимент.....	55
3.8. Заключение.....	57

ГЛАВА 4. КОНТИНУАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЕТЕРО-ГОМОГЕННОГО ПЛАВЛЕНИЯ И ФРАГМЕНТАЦИИ МЕТАЛЛА УЛЬТРАКОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ.....	57
4.1. Введение.....	57
4.2. Математическая модель.....	58
4.3. Система уравнений.....	59
4.4. Уравнение состояния для Al.....	60
4.5. Краевые условия.....	62
4.6. Метод динамической адаптации. Постановка задачи в произвольной нестационарной системе координат.....	65
4.8. Краевые условия.....	68
4.9. Разностные схемы.....	69
4.10. Алгоритм решения.....	71
4.11. Анализ результатов моделирования.....	72
4.12. Валидация и верификация результатов моделирования.....	79
4.13. Заключение.....	81
Заключение. Основные положения, выносимые на защиту.....	82
Список литературы.....	83

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования и степень её научной разработанности. Необходимость разработки новых эффективных методов и подходов решения уравнений математической физики, в частности уравнений Бюргерса и Кортевега-де-Вриза, определяется ростом уровня сложности современных проблем. Для решения этой проблемы используют математическое моделирование [1] физических процессов на ЭВМ неотъемлемой частью которого являются численные методы. Выбор того или иного метода численного решения во многом определяет качество моделирования. Необходимо также иметь в виду, что далеко не безразлично, за счет каких вычислительных затрат достигается конечный результат моделирования. Поэтому вполне естественно на вычислительные алгоритмы наложить требование не только устойчивости, но и вычислительной эффективности и простоты реализации.

В связи с чем, актуальными становятся не только традиционные проблемы повышения точности разностной аппроксимации уравнений, но и методы построения адаптивных расчетных сеток для широкого класса задач математической физики.

Целями и задачами данной диссертации является:

дальнейшее развитие методов динамически адаптирующихся сеток на примере решения модельных уравнений Бюргерса и Кортевега-де Вриза;

построение, исследование и сравнение 2-х и 3-х слойных разностных схем записанных в стационарных и подвижных системах координат;

Применение метода динамической адаптации к численному решению прикладной задачи в области лазерной абляции металлической мишени ультракоротким лазерным излучением.

Основным элементом научной новизны является дальнейшее развитие ранее полученных и разработка новых методов и подходов к построению адаптирующихся к решению сеток на примере хорошо известных модельных задач Бюргерса и Кортевега де-Вриза. Впервые в методе динамической адаптации

использовались трехслойные разностные схемы для решения уравнения Бюргерса и двухслойные для Кортевега де-Вриза.

Также метод динамической адаптации, позволяющий получать решения задач с произвольным числом подвижных границ и гидродинамических разрывов, был применен к численному решению явлений лазерной абляции металлической мишени ультракоротким лазерным излучением. Построена математическая модель плавления перегретого Al под воздействием fs- лазерного излучения. Кинетика плавления перегретого металла анализируется на основе неравновесной континуальной модели, которая явно связывает гомогенные и гетерогенные механизмы плавления.

Теоретическая и практическая ценность исследования.

Все теоретические принципы и подходы, которые были разработаны для модельных уравнений Бюргерса и Кортевега- де -Вриза были использованы в решении прикладной задачи о лазерном воздействии на металлическую мишень. Использование в качестве источника энергии ультракоротких (фемтопикосекундной длительности) лазерных импульсов открывает новые возможности практического применения процессов фрагментации в областях наноструктурирования, нанометаллических покрытий, генерации наночастиц и наноструктур для нужд медицины и биологии и др.

Методология и методы исследования.

Для улучшения диссипативно - дисперсионных свойств разностных схем используется метод динамической адаптации.

Для исследования механизмов ультракороткой лазерной абляции алюминия используется односкоростная неравновесная двухтемпературная континуальная (гидродинамическая) модель.

Реализация осуществляется с помощью разработанного вычислительного алгоритма и созданного программного комплекса на языке C++ для решения уравнений Бюргерса и Кортевега – де –Вриза и для прикладной задачи лазерной абляции металлов.

Апробация результатов. Материалы диссертации докладывались на 17-м и 18-м Международных Междисциплинарных научных Семинарах “Математические Модели и Моделирование в Лазерно-Плазменных Процессах и Передовых Научных Технологиях” (03.06-10.06 2017г.; 29.09-5.10 2019г., Петровац, Черногория); на Международной конференции “27th International Advanced Laser Technologies Conference” (ALT-2019), Prague, Czech Republic, September 15-20, 2019; на Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2021»

Публикации. Основные результаты по теме диссертации опубликованы в работах [2 - 6]:

1. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Comparative analysis of the quality of two-and three-layer difference schemes of the second order // *Mathematica Montisnigri*. 2018. V. 43. P. 31-51. (WoS, MathSciNet)

2. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Two-layer finite-difference schemes for the Korteweg-de Vries equation in Euler variables // *Mathematica Montisnigri*. 2020. V. 49. P. 57-69. Doi: 10.20948/mathmontis-2020-49-5 (WoS, MathSciNet)

3. Быковская Е.Н., Шапранов А.В., Мажукин В.И. Анализ погрешности аппроксимации двухслойных разностных схем для уравнения Кортевега де-Вриза // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2021. № 1. С. 17. Doi: <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-1> (РИНЦ)

4. Быковская Е.Н. Численное решение уравнения Кортевега-де Вриза на подвижной сетке с использованием двухслойных разностных схем // «Ученые записки физического факультета» Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова. 2022. № 1, 2210702. (Список ВАК)

5. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Continual modeling of processes of homoeterogeneous melting and fragmentation of metal by ultrashort laser pulse // *Mathematica Montisnigri*. 2023. V. LVIII, P. 80-93. Doi: 10.20948/mathmontis-2023-58-6 (Scopus, MathSciNet)

Структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 109 страниц и включает в себя 26 рисунков.

В первой главе проводится обзор существующих на данный момент методов построения расчетных сеток для различных задач математической физики. Обсуждаются проблемы поиска способов улучшения диссипативных и дисперсионных свойств разностных схем, используемых для решения задач механики жидкости и газа на примере модельных уравнений Бюргерса и Кортевега -де Вриза. Большое внимание уделяется численным методам решения нелинейного уравнения Кортевега де Вриза. Основной особенностью данного уравнения является наличие третьей пространственной производной, порождающей основные сложности при численном решении. При этом отмечается эффективность применения подвижных сеток в подобных задачах.

Во второй главе на примере численного решения модельного уравнения Бюргерса описывающего конвективно-диффузионные процессы, исследовано качество аппроксимации и точности решения исходного уравнения, а также произведено сравнение с помощью двух- и трехслойных разностных схем, записанных на сетках с фиксированными и подвижными узлами. Метод динамической адаптации был впервые применен к трехслойной разностной схеме.

Третья глава посвящена численному и аналитическому исследованию 2-хслойных явных и неявных разностных схем для уравнения Кортевега-де Вриза. Исследование проводилось как на эйлеровых, так и на подвижных сетках с динамической адаптацией.

В четвертой главе рассматривается задача о континуальном моделировании процессов гетеро-гомогенного плавления и фрагментации металла (Al) ультракоротким лазерным импульсом.

Основные положения, выносимые на защиту:

Применение метода динамической адаптации позволяет существенно улучшить качество разностных схем и с одинаковым успехом использовать двухслойные и трёхслойные схемы при решении уравнения Бюргерса. При этом

двухслойные схемы позволяют осуществлять интегрирование с меньшими вычислительными затратами.

Применение метода динамической адаптации к решению уравнения Кортевега – де Вриза позволяет избавиться от дисперсии практически во всей области невязности двухслойных схем. Явные схемы при этом остаются абсолютно неустойчивыми. В решении задачи о распространении солитона метод динамической адаптации позволяет производить интегрирование с увеличенным на 2 порядка шагом по времени.

Разработана однокоростная неравновесная двухтемпературная континуальная (гидродинамическая) модель ультракороткого лазерного воздействия на металлическую мишень. С помощью метода динамической адаптации выполнено математическое моделирование задач с произвольным числом подвижных границ и гидродинамических разрывов. Проведено исследование гомогенного и гетерогенного механизмов плавления, и фрагментации металлической мишени (Al) лазерным излучением. Получено хорошее совпадение с экспериментальными и теоретическими данными.

Разработаны вычислительные алгоритмы и созданы программные комплексы на языке C++ для решения уравнений Бюргерса и Кортевега – де Вриза и для прикладной задачи лазерной абляции металлов.

Достоверность и обоснованность. Обоснованность полученных результатов следует из корректности поставленных задач, использовании стандартных численных методов и использовании классической континуальной модели. Достоверность результатов следует из валидации (согласия с экспериментальными данными) и верификации (сравнения с теоретическими данными) других авторов.

Личный вклад автора. Содержание диссертационной работы и основные положения, выносимые на защиту, полностью отражают вклад автора в представленные исследования.

В заключении каждой из глав сформулированы результаты, в дальнейшем входящие в **Основные положения, выносимые на защиту**. Список литературы содержит 212 источников.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.

Обзор публикаций

Обзор методов построения расчетных сеток.

В связи с ростом сложности современных задач, проблема построения расчетных сеток не теряет своей актуальности, поскольку от правильного выбора расчетной сетки в значительной степени зависит качество получаемого решения. В настоящее время опубликовано достаточно большое количество методов построения расчетных сеток, позволяющих разрешить многие проблемы математической физики. Тем не менее рост уровня сложности современных проблем обязывает к разработке новых эффективных методов решения уравнений математической физики.

Все существующие расчетные сетки условно можно разделить на два класса: на сетки с фиксированными узлами [7] и на сетки с подвижными узлами [8-10]. Сетки с фиксированными узлами строятся до начала интегрирования и не меняются на протяжении всего времени счета. Также их можно разделить на регулярные и нерегулярные. Регулярными являются сетки, где положение узлов задаётся их нумерацией и для построения подобных сеток применяются различные подходы: геометрический, алгебраический и дифференциальный. В связи с необходимостью построения расчетных сеток в областях произвольной геометрии было разработано большое число алгоритмов построения неструктурированных сеток. Подобный вид сеток берет свое начало из методов конечных элементов, в которых соседство узлов задается с помощью специальных таблиц и алгоритмов определения соседних узлов.

При решении как стационарных [11, 12, 13], так и нестационарных задач [14, 15] широкое распространение получили вариационные методы [11-13, 14-18, 19, 20] и дифференциальные подходы [7]. В вариационных методах в основу

положена идея минимизации одной или нескольких характеристик искомого решения, требующих определения экстремумов некоторых функционалов. Одним из основных преимуществ вариационного подхода является относительная простота требований к сетке, таких как гладкость, ортогональность, существенная неравномерность в определенных областях. Вариационный подход обычно используется для создания структурированных сеток [17], но его также можно использовать для создания неструктурированных сеток [21, 22]. Более того, это основа для ряда методов адаптивных движущихся сеток [23, 24].

Широкое распространение для улучшения качества получаемых решений получили методы построения неравномерных расчетных сеток, адаптирующихся к особенностям задач [8-10, 25-42]. Точность решения уравнений в частных производных напрямую зависит от того, как распределение узлов сетки согласуется с особенностями искомого решения.

Для стационарных задач сетка строится до начала интегрирования уравнений. Для их построения используются как вариационный принцип, так и другие методы построения адаптивных сеток для эллиптических задач [26, 31, 32, 41, 42].

В нестационарных задачах особенности решения, такие как большие градиенты, сильные и слабые разрывы, контактные и фазовые границы, могут возникать, перемещаться и исчезать во всей области определения решения. В подобных ситуациях с оптимальным распределением узлов связана не только проблема повышения точности, но в ряде случаев и сама возможность качественного воспроизведения решения. Для построения сеток в подобных ситуациях были предложены методы построения адаптивно встраивающихся сеток [42, 43-51, 64] и сеток динамически адаптирующихся к решению [52-63]. В первом случае идея методов состоит в дроблении ячеек в областях сильного изменения решения. К минусам можно отнести возможное нарушение законов сохранения.

Также широкое распространение получили многосеточные методы [65-70], впервые используемые Р.П. Федоренко [65]. Многосеточный алгоритм

изначально предназначен для эффективной работы на многопроцессорных вычислительных системах, что дает возможность проводить расчеты на сетках с большим числом узлов. В отличие от адаптивно встраивающихся сеток, идея метода состоит в дроблении ячеек по всей расчетной области.

Одними из наиболее эффективных методов построения расчетных сеток оказались методы с автоматическим преобразованием координат, зависящие от искомого решения. Основной сложностью в данном случае является выбор функции управляющей движением узлов. Методы динамической адаптации [52-63] представляют собой алгоритмы, позволяющие работать как с постоянным [40, 56, 57, 63, 71], так и с переменным числом узлов [53, 54]. Одним из основополагающих моментов, в методах динамической адаптации, является как раз тесная взаимосвязь между динамикой решения и положением узлов сетки, которая приводит к необходимости переопределения узлов сетки на каждом шаге интегрирования. В ранних работах [52, 53] это достигалось с помощью введения различного рода подгоночные параметры [72].

Более оптимальным подходом был метод [56, 73-90], идея которого состоит в переводе исходной задачи в произвольную нестационарную систему координат, в которой неизвестными являются не только сеточные функции, но и координаты узлов сетки. Функция преобразования координат строится таким образом, что скорость движения узлов зависит от эволюции решения уравнений, описывающих физические процессы. Подобный подход позволяет концентрировать большое количество узлов в зонах резкого изменения решения [56].

Во второй и третьей главе данной работы рассматриваются уравнения Бюргерса и Кортевега де Вриза, которые являются модельными для задач волновой физики. Основные затруднения вычислительного процесса обусловлены погрешностью аппроксимации дифференциальных уравнений конечно-разностными схемами, которая проявляется в виде диссипативных и дисперсионных свойств конечно-разностных схем. Аналогичные проблемы свойственны для систем гиперболического типа [91-94], к которым относятся задачи газо-гидродинамики. Для их численного решения за многие годы

исследований разработано большое количество конечно-разностных схем [95-102], имеющих свои преимущества и недостатки, в результате которых классические разностные схемы не всегда могут обеспечить необходимую точность численных решений. Широкое распространение также нашли высокоточные методы [103, 104, 105-112], основанные на достижении более тонкого баланса между ошибками дисперсии и диссипации.

Полное уравнение Бюргерса моделирует поведение нелинейных волн, типичные решения которых могут содержать один или несколько крутых фронтов. Сложности численного решения модельных задач Бюргерса хорошо известны [31].

Уравнение Бюргерса широко используется для тестирования различных конечно-разностных схем как двухслойных, так и трёхслойных [113-120]. Среди них широко используемая хорошо известная трехслойная схема Кабаре [115, 116] с улучшенными дисперсионными и диссипативными свойствами, хотя и обладающей рядом недостатков, вызванных процессом принудительной монотонизации решения.

Еще одним широко используемым уравнением в качестве модельного является уравнение Кортевега де Вриза [123]. Его решением являются стационарные нелинейные волны, а история берет свое начало еще в 19 веке.

Впервые описание большой уединенной волны -солитона привел Джон Скотт Рассел (1808-1882) в 1834 году. (Солитоном называют уединенную волну, движущуюся с постоянной скоростью.) Британский инженер Рассел изучал пропускную способность канала в Шотландии. Он наблюдал движение баржи, которую тянула пара лошадей. При остановке баржи вода собралась у носа баржи в состоянии интенсивного движения, и оторвавшись от носа баржи, с большой скоростью в виде одиночной волны устремлялась вперед. Все время пока Рассел наблюдал волну она не меняла ни скорости, ни формы. Он назвал ее "уединенной волной трансляции".

В 1870-е годы Буссинеск [122] получил уравнение, описывающее распространение волн в противоположных направлениях:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

В эти же годы Рэлей [121] независимо от Буссинеска получил аналогичные результаты. Свое дальнейшее развитие теория получила в 1895 году в работе голландцев Дидерика Иоганна Кортевега (1848-1941) и его ученика Густава де Вриза (точные даты жизни неизвестны) [123]. Их уравнение развивает идею Рассела и названа их именем. Уравнение Кортевега-де Вриза (КдВ) легко можно получить из уравнения Буссинеска, о результатах которого им не было известно.

Как оказалось, солитоны, представляющие собой устойчивое образование, обладают рядом удивительных свойств. Так, распространение солитона в виде нелинейной уединенной волны позволяет ему при своём движении сохранять форму и скорость. Кроме того, для солитонов характерно упругое взаимодействие друг с другом. В процессе столкновения они вначале деформируются, а затем восстанавливают свои исходные параметры и свою первоначальную форму. Учитывая, что распространение солитона описывается нелинейным уравнением, то принцип суперпозиции, как он понимается в линейных системах, согласно которому сумма частных решений также является решением, для него не выполняется. Солитоны именно взаимодействуют между собой, вначале деформируясь, а затем восстанавливая свои исходные параметры в отличие от линейных систем решения, которые проходят друг сквозь друга. Единственным результатом взаимодействия солитонов может быть некоторый сдвиг фаз. Это служит подтверждением того, что солитоны являются именно нелинейными решениями.

В настоящее время процессам возникновения и развития уединенных волн уделяется повышенное внимание, что определяется обширной областью существования подобных явлений. Так в океане, в результате подводных катаклизмов, образуются цунами. Эти невысокие волны, достигающие в высоту нескольких метров и длиной до ста километров, несут большие объемы воды, являющиеся причиной стихийных бедствий на побережье нескольких материков. Уравнение Кортевега-де Вриза описывает также распространение пульсовой

волны в кровеносных сосудах, одномерные волны малой конечной амплитуды в дисперсионных системах. Отметим, что эти приложения являются перспективными для проблем биомедицины.

Активное использование солитонов в исследовании и решении нелинейных волновых уравнений [124], описывающих физические явления во многих областях [125], стимулировало интерес к методам решения уравнения КдВ.

Наличие источника сильной дисперсии в уравнении КдВ – третьей пространственной производной – порождает основные сложности при численном решении задачи Коши для уравнения КдВ. Долгое время основной схемой для решения уравнения КдВ была трехслойная явная схема [126], разработанная авторами Zabusky и Kruskal. Представленная схема была одной из первых с помощью которой удалось получить приемлемое решение. Также в данной работе впервые было показано, что любое начальное возмущение, экспоненциально спадающее на бесконечности, преобразуется в конечный набор солитонов. В работе [127] была использована неявная трехслойная схема, в которой для уменьшения ошибки округления псевдоспектрального метода была предложена искусственная вязкость. Ещё одним примером трёхслойной схемы является известная нам схем Кабаре [148].

Вначале в связи с простотой реализации наиболее применимыми были именно явные разностные схемы. Конечно, попытки построения неявных схем были. Можно отметить некоторые работы в этом направлении. Так еще в 1976 году Грейг и Моррис предложили оригинальный подход, который они называли “методом детской игры классики” [128]. Идея состояла в следующем. Узлы пространственной сетки разделялись на две группы: четные и нечетные. Для четных узлов выполнялся расчет по явной схеме, затем для нечетных – по неявной, которая использовала результаты, полученные в четных узлах. Такой подход позволял избавиться от необходимости решать нелинейную систему уравнений. Матрица решаемой линейной системы имела специфический вид, который как раз напоминал ту самую детскую игру классики. Таким образом, данный подход можно классифицировать как полунеявный метод.

В работе [129] авторы, помимо явного метода предиктор-корректор, предлагают основанную на схеме неявного корректора линеаризованную версию схемы. То есть это неявный метод, для решения линеаризованного исходного уравнения.

В настоящее время весьма популярны так называемые методы коллокаций [130, 131, 132], когда искомые сеточные функции представляют в виде разложения по тем или иным базисным функциям. При этом аппроксимацию по времени осуществляют, как правило, явным методом. Реже применяется неявная аппроксимация. Показательным примером здесь является работа [132]. Автор, используя в качестве базиса sinc-функции, строит в общем виде целое семейство неявных схем для уравнения КдВ. Однако, затем, как и в предыдущей работе [129], решает линеаризованную версию исходного уравнения, хотя и неявным методом.

Стоит отметить, что уравнение КдВ решалось численно различными методами, такими как метод Галеркина [133 - 135, 136 - 138], метод конечных элементов [139 - 141, 142, 143], конечно-разностный метод [144 - 152] и др. Одной из основных задач численного моделирования является поиск баланса между качеством решения и простотой реализации. В наибольшей степени совокупностью этих свойств обладают именно конечно-разностные методы.

Численные примеры, приводимые в этих работах, не являются достаточно убедительными, т.к. демонстрируют различные решения уравнения КдВ на небольших интервалах времени, и таким образом остается открытым вопрос об устойчивом поведении предлагаемых методов на больших промежутках времени.

Ранее в работах [146, 147] производился анализ двухслойных разностных схем для уравнения КдВ с точки зрения интегральных законов сохранения. На основе принципа L2-консервативности для уравнения Кортевега-де Вриза было показано, что двухслойные разностные схемы как явные, так и неявные не удовлетворяют условию L2-консервативности и, более того, являются абсолютно неустойчивыми даже в наиболее слабой норме L2. Этот принцип в этих же работах был применён для построения семейства трехслойных полностью

консервативных (консервативных и L2-консервативных) разностных схем с весами.

Представленные выше уравнения Бюргерса и Кортевега -де Вриза в данной работе рассматриваются в качестве модельных уравнений для отработки различных методов и подходов для решения более сложных задач, таких как реализация в рамках неравновесной континуальной модели с динамически адаптирующимися расчетными сетками механизма гомо-гетерогенного плавления алюминия с последующей фрагментацией расплава под воздействием ультракороткого лазерного импульса

Исследование динамической фрагментации в ударно нагруженных металлах и оценка геометрических и кинематических свойств полученных фрагментов является актуальной проблемой, как для фундаментальной [153,], так и прикладной науки [154,]. Среди динамических процессов фрагментации, откольное разрушение твердых материалов стало одним из широко изучаемых явлений в течение длительного времени [155,], [156,]. Откол при этом определялся как разрыв в теле из-за величины напряжения, превосходящего прочность вещества. Основным механизмом разрушения является, распространяющийся в твердом образце импульс сжатия, который отражаясь от свободной поверхности после взаимодействия с падающей волной разгрузки, создает растягивающие напряжения, которые могут приводить к повреждениям внутри материала, начиная от небольших пустот и трещин до полного разрушения и выброса отколотого материала.

В последнее время отмечается возрастающий интерес к подобным явлениям в жидкой фазе, которые развиваются после частичного или полного плавления образца, например, в результате воздействия сверхмощных ультракоротких лазерных импульсов на металлы, дополнительно подвергающиеся при этом сжатию или растяжению. Экспериментальные и теоретические [160,]-[162] исследования позволили определить сравнительно узкий диапазон значений флюенса, в котором происходит откольная абляция за счет явлений разгрузки в расплаве со стороны облучаемой поверхности. Динамическое дробление

приводит к образованию облака жидких капель расплава, выбрасываемых в окружающую среду с высокой скоростью. Выброс капель расплава свидетельствует о важной роли механизмов плавления в процессе образования жидкой фазы в металле при воздействии ультракоротких лазерных импульсов.

В рамках классической термодинамики, плавление и затвердевание твердых тел определяется, как фазовое превращение I-го рода, происходящее при определенной температуре T_m , которой соответствует равенство свободных энергий твердой и жидкой фаз при одном и том же давлении. Равенство свободных энергий свидетельствует о том, что твердая и жидкая фазы находятся в равновесии. Быстрые фазовые превращения I-го рода, в том числе, плавление / затвердевание, связаны с возникновением метастабильных перегретых / переохлажденных состояний. В последнее время во многих теоретических и экспериментальных работах повышенное внимание уделяется фундаментальным проблемам, в которых твердое вещество может быть перегрето, а жидкое переохлаждено.

Известны два механизма плавления/ кристаллизации твёрдых тел/жидкости: гетерогенный (поверхностный или фронтальный) и гомогенный (объёмный). В первом случае, теоретически и экспериментально было показано, что процесс плавления кристаллических материалов возникает в областях гетерогенного зародышеобразования, таких как свободные поверхности [163], границы зерен [164], интерфейсы [165] и, на участках содержащих структурные дефекты (вакансии, дислокации) [166, 167] и примеси [168], которые значительно снижают энергетические барьеры для нуклеации.

Гетерогенное плавление трактуется как движение поверхности сильного разрыва в сплошной среде. На этой поверхности резко изменяются термодинамические, тепловые и оптические свойства вещества. При этом движение фазового фронта связано с перегревом поверхности твердой фазы.

Гомогенные механизмы фазовых трансформаций характеризуются зарождением новой фазы в некотором объеме перегретого / переохлажденного вещества. В научной литературе, несмотря на выдвинутое множество теорий, до

сих пор не сложилось единого мнения относительно точного определения гомогенного плавления.

Наличие большого количества взаимосвязанных физических процессов с ограниченной информацией об их динамике затрудняет решение указанных проблем посредством чисто экспериментальных исследований. По этой причине, пико- фемто-лазерная абляция продолжает оставаться областью активных исследований, в которых математическое моделирование играет всё большую роль.

Фундаментальные аспекты теории неравновесного лазерного плавления металлов и фрагментации расплавов основываются на математических моделях двух уровней: макроскопического – включающего системы континуальных уравнений, в том числе и неравновесной гидродинамики [169], [161] и микроскопического - обобщающего атомистические системы уравнений [170], [171].

Последняя глава данной работы посвящена математическому моделированию процессов гетеро-гомогенного плавления с последующей фрагментацией расплава, лежащих в основе неравновесной лазерной абляции металла (Al). Исследование механизмов плавления и фрагментации осуществляется в рамках континуального подхода с использованием неравновесной гидродинамической модели [170], [172].

ГЛАВА 2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КАЧЕСТВА ДВУХ-И ТРЕХСЛОЙНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ БЮРГЕРСА НА ЭЙЛЕРОВОЙ И ПОДВИЖНОЙ СЕТКАХ.

2.1. Введение

Численное решение уравнений механики сплошной среды, описывающих процессы конвекции–диффузии с преобладанием конвективного механизма переноса является одной из фундаментальных проблем вычислительной математики и качество решения значительно зависит от аппроксимации членов, описывающих конвективный перенос. Основные затруднения вычислительного

процесса обусловлены погрешностью, возникающей при аппроксимации дифференциальных уравнений конечно-разностными схемами. Погрешность аппроксимации проявляется в виде диссипативных и дисперсионных свойств конечно-разностных схем, что может привести к значительному искажению решения.

Подобные вычислительные особенности часто встречаются в уравнениях газовой динамики [91], теории упругости [92], мелкой воды [93, 94] и др. Для их численного решения, за многие годы исследований, разработано большое количество конечно-разностных схем [95 - 99], имеющих свои преимущества и недостатки. Тем не менее, классические разностные схемы не всегда могут обеспечить необходимую точность численного решения.

Улучшение диссипативных и дисперсионных свойств классических разностных схем осуществляется различными способами. Уменьшение схемной диссипации можно осуществить повышением порядка аппроксимации [98], а для монотонизации решения обычно используются методы искусственной вязкости [97] и нелинейной коррекции [103].

В одной из первых работ [104] построение схемы высокой разрешающей способности (метод Flux Corrected Transport - FCT) достигалось уменьшением диссипации в исходной схеме с низкой дисперсией (схема Годунова 1-го порядка [100]), введением антидиффузионных потоков с сохранением ограниченности решения [102]. Другим примером построения схем высокого разрешения являются схемы повышенного порядка аппроксимации на основе принципа невозрастания полной вариации решения (TVD - Total Variation Diminishing) [103, 105, 106]. К методам, позволяющим строить разностные схемы с низкой дисперсией, относятся также методы ENO/WENO (ENO -essentially non-oscillatory, WENO- Weighted essentially non-oscillatory) [107 - 110]. Эти методы, как и методы TVD, используются для достижения более тонкого баланса между ошибками дисперсии и диссипации. Наибольшее распространение высокоточные методы, основанные на явных широко шаблонных разностных схем [111, 112] повышенного (вплоть до 12-го [173]) порядка аппроксимации, находят в задачах

мелкой воды [174] и аэроакустики [175, 176]. Однако, использование широко шаблонных схем сталкивается с рядом затруднений, связанных с постановкой граничных условий, модификацией шаблонов вблизи границ и чувствительностью используемых схем к степени однородности расчетных сеток.

Использование широко шаблонных схем не является единственным способом получения хороших диссипативных и дисперсионных свойств. Другое направление улучшения свойств разностных схем было сформулировано в работах [113], [114]. На примере решения одномерного уравнения конвективного переноса в этих работах были показаны явные линейные 3-хслойные разностные схемы, обладающие улучшенными дисперсионными и диссипативными свойствами, и известные как схемы Upwind Leapfrog [114] и Cabaret (Compact Accurately Boundary-Adjusting High-REsolution Technique) [113]. Схема Cabaret разработана с учетом результатов схемы Upwind Leapfrog [114]. Предложенная в первых работах [113], [115] схема получила дальнейшее развитие в работах [116], [117]. Необходимая монотонизация решений в областях больших градиентов достигалась с помощью простого алгоритма нелинейной коррекции потоков, базирующегося на принципе максимума [116].

Позже схема Cabaret была обобщена на случаи, описываемые квазилинейными гиперболическими уравнениями [118], [119] и уравнениями газовой динамики в одномерном и двумерном приближении [120].

Целью настоящей главы является демонстрация другого подхода к улучшению диссипативно - дисперсионных свойств разностных схем со вторым порядком аппроксимации. Достижение этой цели осуществляется применением метода динамической адаптации [56], [73], в котором контролируемое распределение узлов расчётной сетки на каждый момент времени осуществляется искомым решением. Полное согласование движения узлов сетки с эволюцией решения приводит к уменьшению диссипации и к полному обнулению дисперсии разностной схемы. Одна из возможностей указанного подхода демонстрируется на примере численного решения уравнения Бюргерса. Эффективность данного подхода определяется из сравнения результатов решения уравнения Бюргерса с

применением двухслойных разностных схем Кранка-Николсона и трехслойных типа Cabaret.

2.2. Постановка задачи на эйлеровой сетке

К задачам конвекции - диффузии сводится ряд математических моделей, составляющих основу задач механики жидкости и газа. Эти модели описывают два основных механизма переноса энергии и вещества: диффузионный и конвективный. В зависимости от внешних условий каждый из механизмов может иметь доминирующее влияние. Для оценки преобладания того или иного или иного процесса обычно используют безразмерные параметры, так называемые числа Пекле (Pe) или Рейнольдса (Re). При $Pe \ll 1$ ($Re \ll 1$) в системе доминирует диффузионный процесс, а при $Pe \gg 1$ ($Re \gg 1$) преобладает конвективный перенос. В случае сильного доминирования конвективного механизма переноса получают класс сингулярно возмущённых нелинейных математических моделей с малым параметром $\mu = Pe^{-1}$ или $\mu = Re^{-1}$ при старшей производной. Нестационарные сингулярно возмущённые модели на основе уравнения Бюргерса допускают возникновение областей сильного изменения решения, распространяющихся в виде различных фронтов и переходных слоёв.

С вычислительной точки зрения сингулярно возмущённые задачи относятся к трудно решаемым проблемам. В частности, разностные схемы, использующиеся для аппроксимации уравнений конвекции – диффузии, как правило, обладают сильной дисперсией, для подавления которой применяются специальные меры. В вычислительной практике широкое применение в качестве тестовой задачи для проблем пограничного слоя, параболизированных и полных уравнений Навье-Стокса находит уравнение Бюргерса с соответствующими краевыми условиями. Полное нелинейное уравнение Бюргерса содержит квадратичную нелинейность в конвективном слагаемом и линейную вязкость в правой части, а его решение, при коэффициенте вязкости, стремящемся к нулю, содержит сильные (ударные волны) разрывы.

С учетом начальных и граничных условий проблема Бюргерса формулируется следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad t > 0, \quad x_0 < x < x_R \quad (2.1)$$

$$t = 0: \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad x_0 < x < x_R \quad (2.2)$$

$$x = x_0: \quad g_0 \left(x, t, u(x), \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0, \quad x = x_R: \quad g_R \left(x, t, u(x), \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0 \quad (2.3)$$

где коэффициент $\mu(x)$ имеет смысл вязкости, $u_0(x)$, $g_0 \left(x, t, u(x), \frac{\partial u}{\partial x} \right)$, $g_R \left(x, t, u(x), \frac{\partial u}{\partial x} \right)$ - заданные функции.

В дальнейшем в качестве начального условия будет использоваться асимметричная синусоида:

$$u^0(x) = u(x, 0) = \sin(2\pi x) + 0.5 \sin(\pi x) \quad (2.4)$$

и граничные условия:

$$u(x_0, t) = u(x_R, t) = 0 \quad (2.5)$$

2.3. Однопараметрические семейства двух- и трехслойных разностных схем второго порядка аппроксимации, $O(\Delta t^2 + h^2)$ на эйлеровой сетке.

Далее, на протяжении всей главы, будут исследоваться два семейства схем: двухслойная схема типа Кранка - Николсона и трехслойная схема Кабаре.

Рассмотрим расчетное пространство $\Omega_{x,t}$, в котором определена, декартова система координат с переменными (x, t) . В пространстве $\Omega_{x,t}$ введем расчетную сетку $\omega_{\Delta x}^{\Delta t}$, в которой для удобства используются узлы с целыми и полуцелыми индексами:

$$\omega_{\Delta x}^{\Delta t} = \left(x_m, t^k \right), \left(x_{m+\frac{1}{2}}, t^{k+\frac{1}{2}} \right) : x_{m+1} = x_m + \Delta x_m, x_{m+\frac{1}{2}} = x_m + \frac{\Delta x_m}{2},$$

$$t^{k+1} = t^k + \Delta t^k, t^{k+\frac{1}{2}} = t^k + \frac{\Delta t^k}{2}, \quad m = \overline{0, N}; k = \overline{0, J}$$

Двухслойная схема типа Кранка – Николсона.

Однопараметрические семейство *двухслойных* схем для уравнения Бюргерса, выписанное на расчетной сетке с фиксированными узлами, имеет вид:

$$\begin{aligned} & \frac{u_{m-1/2}^{k+1} - u_{m-1/2}^k}{\Delta t^j} = \\ & = \sigma \left[-\frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{(u_{m+1/2}^{k+1})^2}{2} - \frac{(u_{m-3/2}^{k+1})^2}{2} \right) + \frac{\mu}{\Delta x} \left(\frac{u_{m+1/2}^{k+1} - u_{m-1/2}^{k+1}}{\Delta x} - \frac{u_{m-1/2}^{k+1} - u_{m-3/2}^{k+1}}{\Delta x} \right) \right] + \\ & + (1 - \sigma) \left[-\frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{(u_{m+1/2}^k)^2}{2} - \frac{(u_{m-3/2}^k)^2}{2} \right) + \frac{\mu}{\Delta x} \left(\frac{u_{m+1/2}^k - u_{m-1/2}^k}{\Delta x} - \frac{u_{m-1/2}^k - u_{m-3/2}^k}{\Delta x} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

где σ - весовой множитель, определяющий степень неявности разностной схемы, $0 < \sigma < 1$. При $\sigma = 0.5$ имеем симметричную схему Кранка - Николсона со вторым порядком аппроксимации $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$.

Система разностных уравнений (2.6) решалась итерационным методом Ньютона с применением на каждой итерации прогонки [181] для решения системы линейных алгебраических уравнений. Шаг интегрирования $\Delta \tau^k$ выбирался автоматически, исходя из заданной точности и максимального числа итераций.

Трехслойная схема типа Кабаре.

Используя подход к построению неявной трехслойной разностной схемы для линейного уравнения переноса, изложенный в [120], выпишем семейство *трехслойных* неявных схем типа Cabaret, состоящих из 3-х частей (2.7) – (2.9), для уравнения Бюргерса (2.12.12.1). При этом алгоритм численного решения неявной трехслойной схемы (2.7) – (2.9) состоит из двух этапов.

На первом этапе решается система нелинейных алгебраических уравнений (2.7), откуда находятся консервативные переменные на первом полушаге по времени:

$$\begin{aligned} & \text{Временной переход } u_{m-1/2}^k \rightarrow u_{m-1/2}^{k+1/2} \\ & \frac{u_{m-1/2}^{k+1/2} - u_{m-1/2}^k}{\Delta \tau/2} + \sigma_1 \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{(u_{m-1/2}^{*k+1})^2}{2} - \frac{(u_{m-1/2}^{*k})^2}{2} \right) + (1 - \\ & - \sigma_1) \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{(u_{m-1/2}^k)^2}{2} - \frac{(u_{m-3/2}^k)^2}{2} \right) = (1 - \sigma_2) \frac{\mu}{\Delta x} \left[\left(\frac{u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_{m-1/2}^{k+1/2}}{\Delta x} \right) - \left(\frac{u_{m-1/2}^{k+1/2} - u_{m-3/2}^{k+1/2}}{\Delta x} \right) \right] + \\ & + \sigma_2 \frac{\mu}{\Delta x} \left[\left(\frac{u_{m+1/2}^k - u_{m-1/2}^k}{\Delta x} \right) - \left(\frac{u_{m-1/2}^k - u_{m-3/2}^k}{\Delta x} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.7)$$

Для замыкания системы осуществляется экстраполяция потоковых переменных в пределах пространственно-временных ячеек.

$$u_m^{*k+1} = \begin{cases} 2u_{m-1/2}^{k+1/2} - u_{m-1}^k, & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} > 0; \\ u_{m-1/2}^{k+1/2} + u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_m^k, & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} = 0; \\ 2u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_{m+1}^k, & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} < 0; \end{cases} \quad (2.8)$$

На втором этапе решается система разностных уравнений (2.9), из которых находятся консервативные переменные $u_{m-1/2}^{k+1}$ на новом временном слое [115], [116]:

$$\begin{aligned} & \text{Временной переход } u_{m-1/2}^{k+1/2} \rightarrow u_{m-1/2}^{k+1} \\ & \frac{u_{m-1/2}^{k+1} - u_{m-1/2}^{k+1/2}}{\Delta\tau/2} + (1 - \sigma_1) \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{(u_m^{k+1})^2}{2} - \frac{(u_{m-1}^{k+1})^2}{2} \right) + \sigma_1 \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{(u_m^k)^2}{2} - \right. \\ & \left. \frac{(u_{m-1}^k)^2}{2} \right) = \sigma_2 \frac{\mu}{\Delta x} \left[\left(\frac{u_{m+1/2}^{k+1} - u_{m-1/2}^{k+1}}{\Delta x} \right) - \left(\frac{u_{m-1/2}^{k+1} - u_{m-3/2}^{k+1}}{\Delta x} \right) \right] + \\ & + (1 - \sigma_2) \frac{\mu}{\Delta x} \left[\left(\frac{u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_{m-1/2}^{k+1/2}}{\Delta x} \right) - \left(\frac{u_{m-1/2}^{k+1/2} - u_{m-3/2}^{k+1/2}}{\Delta x} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.9)$$

При $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.5$ получается схема со вторым порядком аппроксимации $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$.

Также как и в случае двухслойной схемы для решения разностных схем (2.7), (2.9) использовался итерационный метод Ньютона с применением на каждой итерации прогонки. Шаг интегрирования $\Delta\tau^k$ выбирался автоматически исходя из заданной точности и максимального числа итераций. Для достижения монотонности решения при наличии больших градиентов после каждой итерации производится монотонизация полученного решения на основе принципа максимума:

$$u_{m,(s+1)}^{k+1} = \begin{cases} \min(u_{m-1}^k, u_m^k), & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} > 0, u_{m,(s+1)}^{k+1} \leq \min(u_{m-1}^k, u_m^k); \\ \max(u_{m-1}^k, u_m^k), & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} > 0, u_{m,(s+1)}^{k+1} \geq \max(u_{m-1}^k, u_m^k); \\ u_{m,(s+1)}^{k+1}, & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} > 0, \min(u_{m-1}^k, u_m^k) \leq u_{m,(s+1)}^{k+1} \leq \max(u_{m-1}^k, u_m^k); \\ \min(u_{m+1}^k, u_m^k), & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} < 0, u_{m,(s+1)}^{k+1} \leq \min(u_{m+1}^k, u_m^k); \\ \max(u_{m+1}^k, u_m^k), & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} < 0, u_{m,(s+1)}^{k+1} \geq \max(u_{m+1}^k, u_m^k); \\ u_{m,(s+1)}^{k+1}, & \text{for } u_{m-1/2}^{k+1/2} < 0, \min(u_{m+1}^k, u_m^k) \leq u_{m,(s+1)}^{k+1} \leq \max(u_{m+1}^k, u_m^k); \end{cases} \quad (2.10)$$

где s – номер итерации функции.

2.4. Алгоритм численного решения и сравнение результатов расчетов на двухслойных и трехслойных схемах на сетках с фиксированными узлами

Разработанные разностные схемы (2.6), (2.7) – (2.9) использовались для проведения серии расчетов с последующим сравнением между собой и анализом результатов качества свойств схем. В качестве тестовой задачи рассматривалось нелинейное уравнение (2.1) с начальным условием в виде ассиметричной синусоиды (2.4) и граничными условиями (2.5).

Расчеты проводились на сетке с достаточно большим количеством узлов – $N = 2500$. Величина параметра μ выбиралась из диапазона значений $\mu \in \{10^{-3} \div 10^{-6}\}$.

Моделирование показало, что движущиеся навстречу друг другу две полуволны синусоиды образуют крутой фронт, толщина которого определяется значением параметра μ . Применение двухслойной схемы Кранка - Николсона (2.6) показало, что небольшие паразитные колебания на верхней части фронта появляются уже при $\mu = 10^{-3}$ (Рис. 1а). В то же время в решении $u(x)$, полученном из трехслойной схемы с монотонизацией (2.7) – (2.10) при таком значении μ колебания полностью отсутствуют (Рис. 1б).

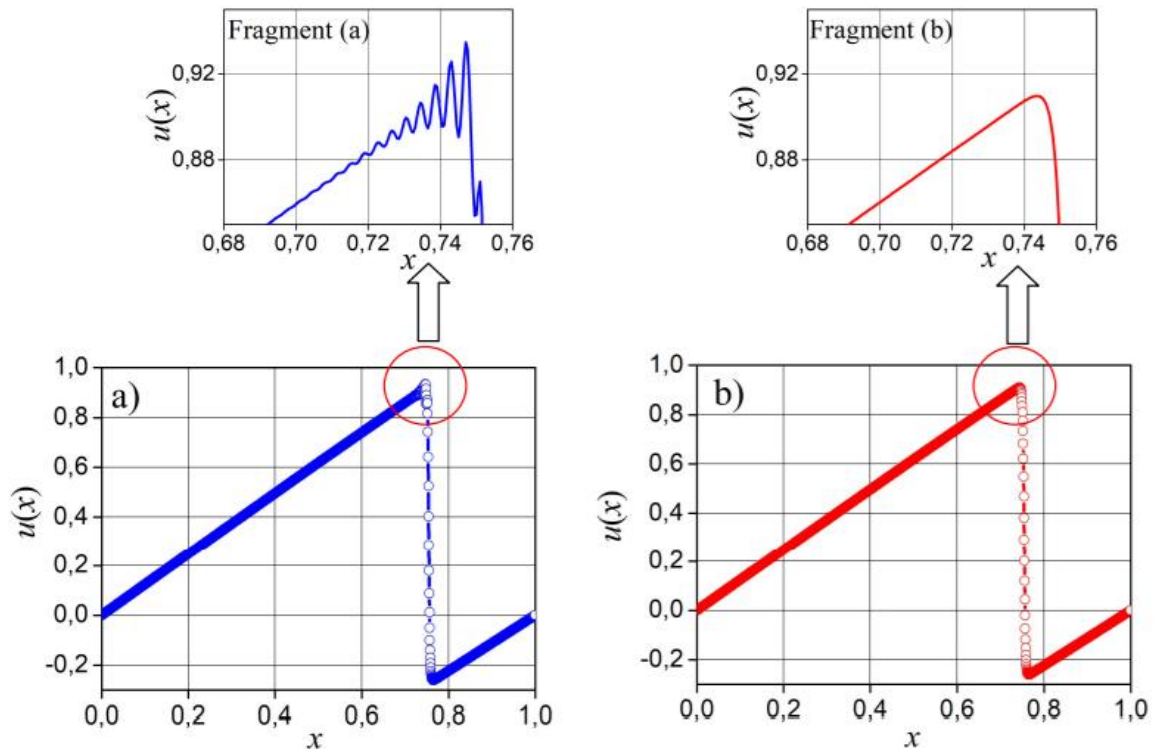


Рис. 1. Двухслойная (a) и трехслойная (b) схемы, $\mu = 10^{-3}$ в момент времени $t = 0.75$; $N = 2500$

Дальнейший рост градиента решения, вызванный уменьшением параметра $\mu = 10^{-4} - 10^{-6}$ приводит к усилению паразитных колебаний для решения на двухслойной схеме (2.6), (Рис. 2). Это свидетельствует об усилении дисперсионных свойств схемы. От этого эффекта свободна трехслойная схема, использующая процедуру монотонизации решения, (2.7) – (2.10) во всем диапазоне значений параметра μ (Рис.3).

Таким образом, трёхслойные разностные схемы типа Cabaret, выписанные на расчетных сетках с фиксированными узлами, на первый взгляд, имеют явное преимущество по дисперсионным свойствам перед двухслойными схемами Кранка-Николсона.

Однако, как отмечалось в работе [120] монотонизация решения после каждой итерации в области больших градиентов приводит к отклонению результата от аналитического решения исходной системы нелинейных разностных уравнений и может препятствовать сходимости итерационного процесса.

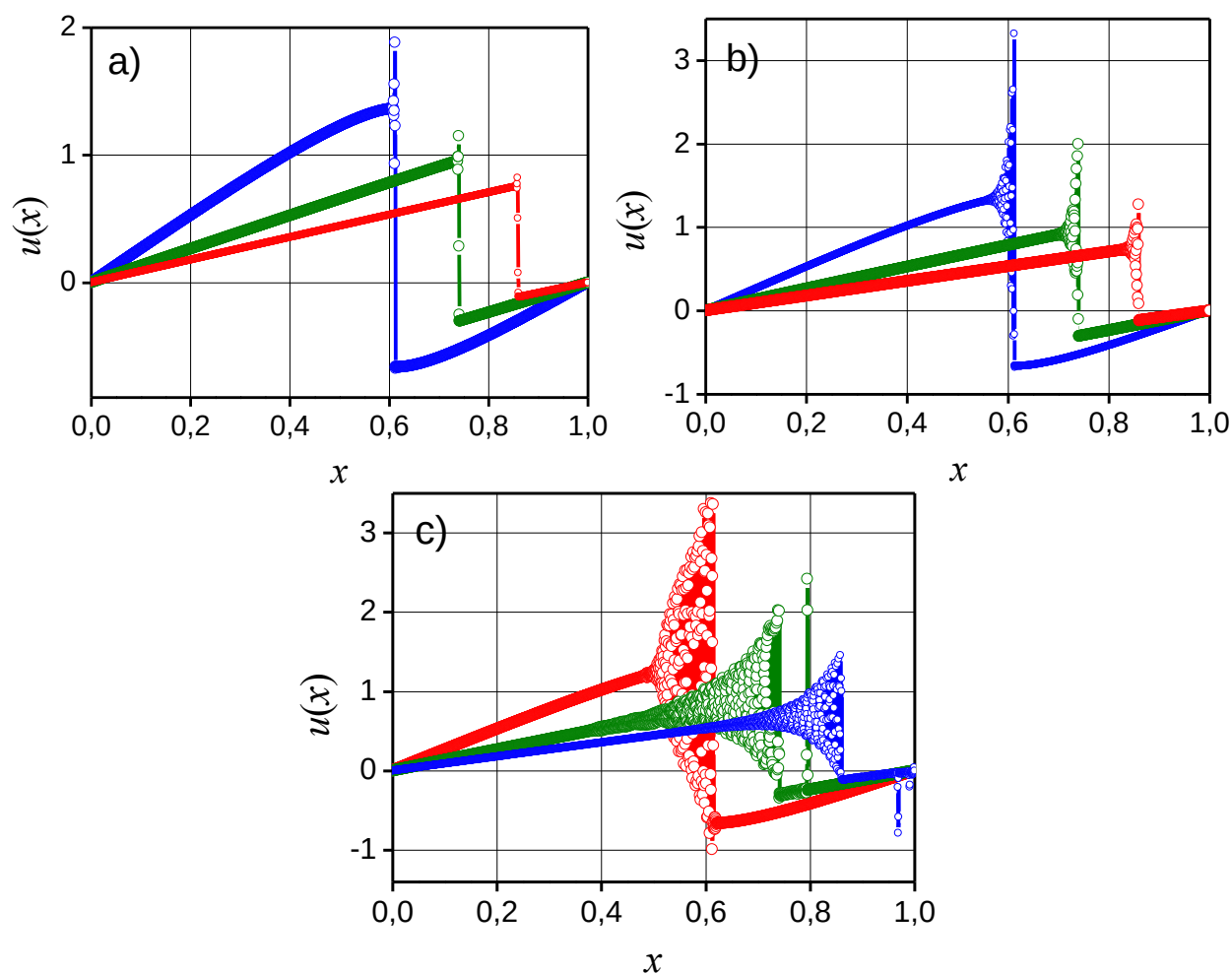


Рис. 2. Двухслойная схема, а) $\mu = 10^{-4}$, б) $\mu = 10^{-5}$, в) $\mu = 10^{-6}$. Пространственные профили решения $u(x)$ в моменты времени $t_{1-3} = 0.25, 0.63, 1$; $N = 2500$

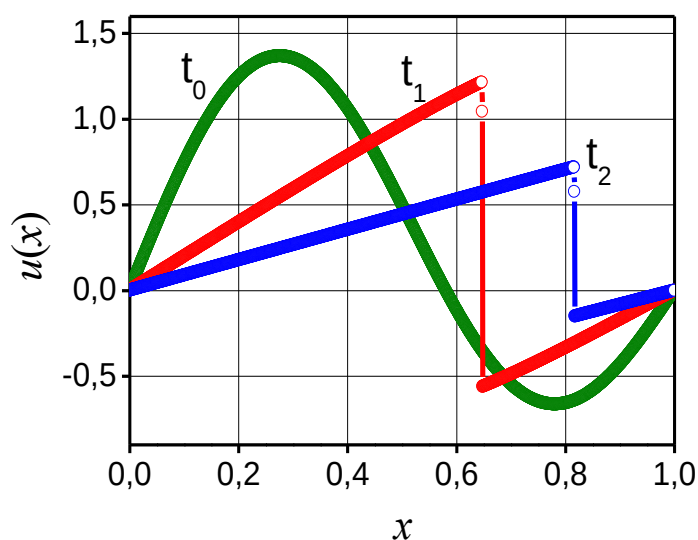


Рис.3. Трёхслойная схема с монотонизацией, $\mu = 10^{-6}$. Пространственные профили решения $u(x)$ в моменты времени $t_{1-3} = 0, 0.38, 1$; $N = 2500$

В рассматриваемой модельной задаче (2.1), (2.4), (2.5) этот недостаток наиболее ярко проявляется в замедлении движения фронта численного решения. Отклонение решения в области больших градиентов вызвано применением монотонизации, что подтверждается сравнением результатов расчетов, выполненных с монотонизацией решения и без неё (Рис. 4а, б). Фронт решения без процесса монотонизации заметно опережает фронт с монотонизацией. Отставание зависит от параметра μ . При уменьшении параметра μ отставание сокращается, но появляются паразитные колебания (Рис. 4б). Это свидетельствует о том, что используемая процедура монотонизации, успешно подавляющая паразитную дисперсию, вносит погрешность в скорость движения фронта. Таким образом, подход к улучшению качества решения с помощью разностных схем, предложенный в [115] - [120] не свободен от определенных недостатков.

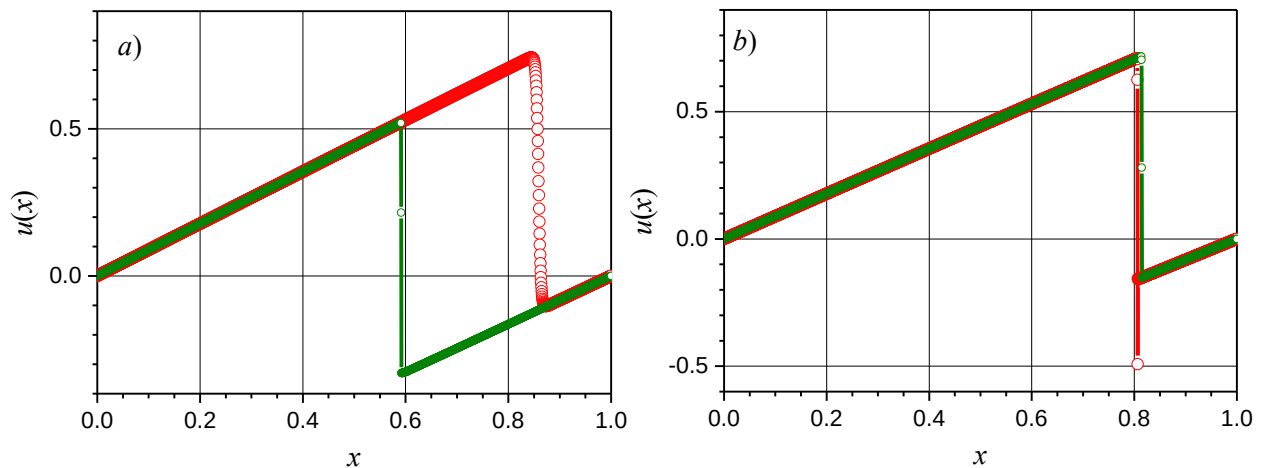


Рис. 4. Решение, полученное с помощью трехслойной схемы с монотонизацией (зелёная линия с маркерами) и без монотонизации (красная линия с маркерами) в момент времени $t=1$ для -а) $\mu = 10^{-3}$ б) $\mu = 10^{-5}$; $N = 2500$

Таким образом, на эйлеровой сетке не удастся получить качественного решения ни для одной из представленных схем даже при использовании достаточно малого пространственного шага. В настоящей работе в качестве альтернативы уменьшение погрешности аппроксимации предлагается осуществлять с помощью метода динамической адаптации расчетных сеток [73], [53], [56]. Метод динамической адаптации широко использовался для решения одномерных газодинамических задач [54], [57], [63] одномерных и двумерных

уравнений параболического типа [74], [55], [75], [76] одномерных и двумерных задач Стефана с подвижными фазовыми границами [77] – [83] и в ряде задач лазерного воздействия на вещество [84] – [88].

2.5. Разработка трёхслойной разностной схемы на сетках с динамической адаптацией.

Метод динамической адаптации.

В основу метода динамической адаптации положена процедура перехода из физического пространства $\Omega_{x,t}$ с декартовой системой координат и переменными (x, t) в некоторое расчетное пространство $\Omega_{q,\tau}$ с произвольной нестационарной системой координат и переменными (q, τ) . Произвольность нестационарной системы координат означает, что скорость движения этой системы координат заранее неизвестна и должна определяться по ходу решения. Переход к произвольной нестационарной системе координат позволяет проблеме построения и адаптации расчетных сеток формулировать на дифференциальном уровне, благодаря этому в получаемой математической модели часть дифференциальных уравнений описывает физические процессы, а другая – поведение узлов сетки [89], [54]. Это позволяет адаптировать сетки к разнообразным особенностям решения, в том числе к таким как: большие градиенты [89], [73], [53] подвижные границы [75] – [79] и разрывные решения [54], [63].

Формально осуществить переход из физического пространства $\Omega_{x,t}$ с эйлеровыми переменными (x, t) в некоторое расчетное пространство с произвольной нестационарной системой координат $\Omega_{q,\tau}$ и переменными (q, τ) можно воспользовавшись заменой переменных общего вида $x = f(q, \tau)$, $t = \tau$. Предполагается, что этому преобразованию соответствует однозначное невырожденное обратное преобразование $q = \varphi(x, t)$, $\tau = t$. Частные производные зависимых переменных при переходе из одной системы в другую связаны следующими выражениями:

$$\frac{\partial \cdot}{\partial t} = \frac{\partial \cdot}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q}; \quad \frac{\partial \cdot}{\partial x} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q}; \quad \frac{\partial^2 \cdot}{\partial x^2} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \quad (2.11)$$

где $\psi = \partial x / \partial q$ - якобиан обратного преобразования, функция Q характеризует скорость движения нестационарной системы координат, и входит в уравнение обратного преобразования:

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = -Q \quad (2.12)$$

Q заранее неизвестна и будет определена применительно к решаемой задаче в дальнейшем.

Постановка задачи на сетках с динамической адаптацией

Возможности уменьшения погрешности аппроксимации двух и трёхслойных разностных схем рассмотрим на примере численного решения задачи Бюргерса (2.1), (2.4), (2.5) с помощью метода динамической адаптации. Для этого в расчетном пространстве $\Omega_{q,\tau}$ с помощью соотношений (2.11) представим дифференциальную модель (2.1) в переменных (q, τ) :

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{u^2}{2} \right) = \frac{\mu}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} \quad (2.13)$$

Продифференцировав уравнение обратного преобразования (2.12) по переменной q можно представить его в форме более удобной для использования

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q} \quad (2.14)$$

Далее представим уравнение Бюргерса (2.13) в дивергентной форме, выпишем дифференциальную модель (2.13) -- (2.14) в окончательном виде:

$$\frac{\partial(\psi u)}{\partial \tau} = -\frac{\partial(Q \cdot u)}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{u^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \frac{\mu}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q}, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q}, \quad (2.16)$$

$$q_0 < q < q_R, \quad \tau > 0$$

Уравнения (2.15), (2.16) дополним начальными

$$\tau = 0: \quad u(q, 0) = \sin(2\pi q) + 0.5 \sin(\pi q), \quad \psi(q, 0) = 1;$$

и граничными условиями:

$$q = q_0: u(q_0, \tau) = Q(q_0, \tau) = 0 \quad (2.17)$$

$$q = q_R: u(q_R, \tau) = Q(q_R, \tau) = 0$$

Уравнение (2.14) используется для построения адаптирующей к решению сетки. Его разностный аналог описывает динамику узлов сетки, а функция Q осуществляет контролируемое движение узлов сетки, согласованное с динамикой искомого решения. Согласование достигается введением функциональной зависимости функции Q от искомого решения. Оптимальная функция преобразования Q , обеспечивающая полную согласованность механизма адаптации с искомым решением, определяется из принципа квазистационарности [73], [56], [75].

Смысл принципа квазистационарности заключается в требовании перехода в такую нестационарную систему координат, в которой временные производные решения будут близки или равны нулю: $\partial u / \partial \tau = 0$. При выполнении этого условия уравнение (2.13) принимает вид:

$$\frac{Q}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{u^2}{2} \right) = \frac{\mu}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} \quad (2.18)$$

и служит для определения функции Q :

$$Q = - \left(u - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\mu}{\psi} \right) - \frac{\mu}{\psi} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial q^2} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial q} + re \right)^{-1} \right) \quad (2.19)$$

где $re \ll 1$ - регуляризатор, предотвращающий обращение первой производной в нуль. Особенностью решаемой задачи является возникающий крутой градиент. Следовательно необходимо, чтобы адаптация осуществлялась под эту особенность, т. е. концентрировала узлы в области большого градиента. Третье слагаемое оказывает существенное влияние только в ближайшей окрестности двух точек экстремума. В областях гладкости решения, включая сам фронт, величина третьего слагаемого мала по сравнению с остальными, $\left| \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} \right| \ll \left| \frac{\partial u}{\partial q} \right|$, и не оказывает влияния на адаптацию к данной особенности. Поэтому третьим слагаемым пренебрегаем. В результате этого производная по времени

становится не строго равной нулю, а малой, и условие строгой стационарности трансформируется в условие квазистационарности.

Таким образом, окончательный вид функции Q , который мы будем использовать в дальнейшем:

$$Q = - \left(u - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\mu}{\psi} \right) \right) \quad (2.20)$$

2.6. Двухслойные и трехслойные разностные схемы на сетке с динамической адаптацией.

Введем в пространстве $\Omega_{q,\tau}$ расчётную сетку $\omega_{\Delta q}^{\Delta \tau}$:

$$\omega_{\Delta q}^{\Delta \tau} = \left(\begin{array}{l} (q_m, \tau^k); \quad q_{m+1} = q_m + \Delta q, \quad \tau^{k+1} = \tau^k + \Delta \tau^k, \quad q_{m+\frac{1}{2}} = q_m + \frac{\Delta q}{2}, \quad t^{k+\frac{1}{2}} = t^k + \frac{\Delta t^k}{2} \\ m = 0, 1, \dots, N-1, \quad k = 0, 1, \dots, J \end{array} \right).$$

Двухслойная схема типа Кранка -Николсона.

Используя расчётную сетку с целыми и полуцелыми узлами, выпишем семейство двухслойных консервативных разностных схем для системы уравнений (2.15) - (2.17). К целым узлам будем относить функции x_m^k , u_m^k , Q_m^k к полуцелым $(q_{m+1/2}, \tau^k)$ - сеточные функции $\psi_{m+1/2}^k$. Семейство двухслойных разностных схем имеет вид:

$$(\psi u)_m^{k+1} = (\psi u)_m^k - \frac{\Delta \tau^k}{\Delta x} \left\{ (1-\sigma) \left[\frac{u_{m+1/2}^2}{2} - \frac{u_{m-1/2}^2}{2} - \frac{\mu}{\psi_{m+1/2}} \frac{u_{m+1} - u_m}{\Delta x} + \frac{\mu}{\psi_{m-1/2}} \frac{u_m - u_{m-1}}{\Delta x} + (uQ)_{m+1/2} - (uQ)_{m-1/2} \right]^k + \right. \\ \left. + \sigma \left[\frac{u_{m+1/2}^2}{2} - \frac{u_{m-1/2}^2}{2} - \frac{\mu}{\psi_{m+1/2}} \frac{u_{m+1} - u_m}{\Delta x} + \frac{\mu}{\psi_{m-1/2}} \frac{u_m - u_{m-1}}{\Delta x} + (uQ)_{m+1/2} - (uQ)_{m-1/2} \right]^{k+1} \right\} \quad (2.21)$$

$$\psi_{m+1/2}^{k+1} = \psi_{m+1/2}^k - \frac{\Delta \tau^k}{\Delta x} \left((1-\sigma) [Q_{m+1} - Q_m]^k + \sigma [Q_{m+1} - Q_m]^{k+1} \right) \quad (2.22)$$

$$Q_m = - \left[u_m - \frac{\mu}{\Delta x} \left(\frac{1}{\psi_{m+1/2}} - \frac{1}{\psi_{m-1/2}} \right) \right]$$

В расчетах использовалась схема Кранка – Николса ($\sigma = 0.5$) со вторым порядком аппроксимации $O(\Delta\tau^2 + \Delta q^2)$. Поскольку механизм динамической адаптации формулируется на дифференциальном уровне, то основные отличия вычислительного алгоритма в переменных (q, τ) связаны с появлением дополнительного уравнения (2.16). Система из двухслойных разностных схем (2.21), (2.22) решалась раздельными прогонками с внутренними и внешними итерациями.

Трехслойная схема типа Кабаре.

Алгоритм численного решения неявной трехслойной схемы, как и в переменных (x, t) состоит из двух этапов. Вначале решается система нелинейных алгебраических уравнений на первом полушаге по времени, откуда находятся консервативные переменные $u_{m-1/2}^{k+1/2}$.

$$\begin{aligned} & \frac{\psi_{m-1/2}^{k+1/2} u_{m-1/2}^{k+1/2} - \psi_{m-1/2}^k u_{m-1/2}^k}{\Delta\tau/2} + \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta q} \left(\frac{(u_m^{*k+1})^2}{2} - \frac{(u_{m-1}^{*k+1})^2}{2} - Q_m^{k+1} u_m^{*k+1} + Q_{m-1}^{k+1} u_{m-1}^{*k+1} \right) + \\ & \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta q} \left(\frac{(u_m^k)^2}{2} - \frac{(u_{m-1}^k)^2}{2} - Q_m^k u_m^k + Q_{m-1}^k u_{m-1}^k \right) = \\ & = \frac{1}{2} \frac{\mu}{\Delta q} \left[\left(\frac{2}{\psi_{m+1/2}^{k+1/2} + \psi_{m-1/2}^{k+1/2}} \frac{u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_{m-1/2}^{k+1/2}}{\Delta q} \right) - \left(\frac{2}{\psi_{m-1/2}^{k+1/2} + \psi_{m-3/2}^{k+1/2}} \frac{u_{m-1/2}^{k+1/2} - u_{m-3/2}^{k+1/2}}{\Delta q} \right) \right] \quad (2.23) \\ & + \\ & + \frac{1}{2} \frac{\mu}{\Delta q} \left[\left(\frac{2}{\psi_{m+1/2}^k + \psi_{m-1/2}^k} \frac{u_{m+1/2}^k - u_{m-1/2}^k}{\Delta q} \right) - \left(\frac{2}{\psi_{m-1/2}^k + \psi_{m-3/2}^k} \frac{u_{m-1/2}^k - u_{m-3/2}^k}{\Delta q} \right) \right] \end{aligned}$$

Для замыкания системы осуществляется экстраполяция потоковых переменных в рамках пространственно-временных ячеек

$$u_m^{*k+1} = \begin{cases} 2u_{m-1/2}^{k+1/2} - u_{m-1}^k, & \text{при } (u_{m-1/2}^{k+1/2} - Q_{m-1/2}^{k+1/2}) > 0; \\ u_{m-1/2}^{k+1/2} + u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_m^k, & \text{при } (u_{m-1/2}^{k+1/2} - Q_{m-1/2}^{k+1/2}) = 0; \\ 2u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_{m+1}^k, & \text{при } (u_{m-1/2}^{k+1/2} - Q_{m-1/2}^{k+1/2}) < 0; \end{cases} \quad (2.24)$$

На втором этапе решается система разностных уравнений на втором полушаге и, тем самым, находятся консервативные переменные $u_{m-1/2}^{k+1}$ на новом временном слое

$$\begin{aligned}
 & \frac{\psi_{m-1/2}^{k+1} u_{m-1/2}^{k+1} - \psi_{m-1/2}^{k+1/2} u_{m-1/2}^{k+1/2}}{\Delta \tau / 2} + \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta q} \left(\frac{(u_m^{k+1})^2}{2} - \frac{(u_{m-1}^{k+1})^2}{2} - Q_m^{k+1} u_m^{k+1} + Q_{m-1}^{k+1} u_{m-1}^{k+1} \right) + \\
 & + \frac{1}{2} \frac{1}{\Delta q} \left(\frac{(u_m^k)^2}{2} - \frac{(u_{m-1}^k)^2}{2} - Q_m^k u_m^k + Q_{m-1}^k u_{m-1}^k \right) = \\
 & = \frac{1}{2} \frac{\mu}{\Delta q} \left[\left(\frac{2}{\psi_{m+1/2}^{k+1} + \psi_{m-1/2}^{k+1}} \frac{u_{m+1/2}^{k+1} - u_{m-1/2}^{k+1}}{\Delta q} \right) - \left(\frac{2}{\psi_{m-1/2}^{k+1} + \psi_{m-3/2}^{k+1}} \frac{u_{m-1/2}^{k+1} - u_{m-3/2}^{k+1}}{\Delta q} \right) \right] + \\
 & + \frac{1}{2} \frac{\mu}{\Delta q} \left[\left(\frac{2}{\psi_{m+1/2}^{k+1/2} + \psi_{m-1/2}^{k+1/2}} \frac{u_{m+1/2}^{k+1/2} - u_{m-1/2}^{k+1/2}}{\Delta q} \right) - \left(\frac{2}{\psi_{m-1/2}^{k+1/2} + \psi_{m-3/2}^{k+1/2}} \frac{u_{m-1/2}^{k+1/2} - u_{m-3/2}^{k+1/2}}{\Delta q} \right) \right] \quad (2.25)
 \end{aligned}$$

Для уравнения преобразования системы координат (2.16) использовалась двухслойная схема (2.22). Разностные схемы первого (2.23) и второго (2.25) этапов, решалась совместно с двухслойной схемой (2.22). Принципиальным моментом вычислительного алгоритма является исключение из решения процедуры монотонизации, поскольку она оказывается избыточной.

2.7. Дифференциальное приближение разностных схем.

Посредством анализа дифференциального приближения трёхслойной разностной схемы покажем, что найденная функция будет оптимальной в смысле качества решения при минимальном числе узлов сетки.

Рассмотрим объединение двух частей (2.23) и (2.25) трёхслойной разностной схемы для уравнения (2.15) (по аналогии с [120]). Поскольку используется требование квазистационарности в постановке задачи, которая требует близости к нулю производных по времени, то их аппроксимацией можно пренебречь.

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\Delta q} \left(\frac{(u_m^{k+1})^2}{2} - \frac{(u_{m-1}^{k+1})^2}{2} - Q_m^{k+1} u_m^{k+1} + Q_{m-1}^{k+1} u_{m-1}^{k+1} \right) + \\
 & + \frac{1}{\Delta q} \left(\frac{(u_m^k)^2}{2} - \frac{(u_{m-1}^k)^2}{2} - Q_m^k u_m^k + Q_{m-1}^k u_{m-1}^k \right) = \\
 & = \frac{\mu}{2\Delta q} \left[\left(\frac{2}{\psi_{m+1/2}^{k+1} + \psi_{m-1/2}^{k+1}} \frac{u_{m+1/2}^{k+1} + u_{m-1/2}^{k+1}}{\Delta q} \right) - \left(\frac{2}{\psi_{m-1/2}^{k+1} + \psi_{m-3/2}^{k+1}} \frac{u_{m-1/2}^{k+1} + u_{m-3/2}^{k+1}}{\Delta q} \right) \right] \\
 & + \frac{\mu}{2\Delta q} \left[\left(\frac{2}{\psi_{m+1/2}^k + \psi_{m-1/2}^k} \frac{u_{m+1/2}^k + u_{m-1/2}^k}{\Delta q} \right) - \left(\frac{2}{\psi_{m-1/2}^k + \psi_{m-3/2}^k} \frac{u_{m-1/2}^k + u_{m-3/2}^k}{\Delta q} \right) \right] \\
 & + \frac{\mu}{\Delta q} \left[\left(\frac{2}{\psi_{m+1/2}^{k+1/2} + \psi_{m-1/2}^{k+1/2}} \frac{u_{m+1/2}^{k+1/2} + u_{m-1/2}^{k+1/2}}{\Delta q} \right) - \left(\frac{2}{\psi_{m-1/2}^{k+1/2} + \psi_{m-3/2}^{k+1/2}} \frac{u_{m-1/2}^{k+1/2} + u_{m-3/2}^{k+1/2}}{\Delta q} \right) \right]
 \end{aligned}$$

При использовании метода конечных разностей численно решается не исходное уравнение в частных производных, а некоторое модифицированное уравнение, называемое дифференциальным приближением разностной схемы [182, 72]. Правая часть этого приближения является погрешностью аппроксимации и равна разности между исходным уравнением в частных производных и его конечно-разностным аналогом. Анализ правых частей дифференциальных приближений позволяет установить преобладающий вклад в погрешность аппроксимации старших производных и, связанных с ними таких свойств разностных схем, как диссипация и дисперсия. Известно, что если главный член в выражении для погрешности аппроксимации содержит производные четного порядка, то преобладающими свойствами разностных схем будут диссипативные, а если производные нечетного порядка – то дисперсионные.

Запишем для разностной схемы (2.23) – (2.25) ее дифференциальное приближение [3]. Для получения дифференциальных приближений воспользуемся стандартной процедурой разложения сеточных функций в окрестности точки $(m, m+1/2)$ в ряд Тейлора. Опуская несложные, но громоздкие преобразования, запишем дифференциальное приближение в окончательном виде.

$$\frac{Q}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{u^2}{2} \right) - \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\mu}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} \right) = \frac{1}{\psi} \left(\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial q^3} + \gamma \frac{\partial^4 u}{\partial q^4} + \delta \frac{\partial^3}{\partial q^3} \left(\frac{1}{\psi} \right) \right) \quad (2.26)$$

Коэффициенты при производных в правой части уравнения (2.26) α , β , γ , δ выражаются следующим образом

$$\alpha = -\frac{\Delta q^2}{32} \left(4 \frac{\partial u}{\partial q} - \mu \frac{\partial^2}{\partial q^2} \left(\frac{1}{\psi} \right) \right), \quad \beta = \frac{\Delta q^2}{24} \left(\mu \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\psi} \right) - u - Q \right), \quad \gamma =$$

$$\frac{\Delta q^2}{48} \frac{\mu}{\psi}, \quad \delta = \mu \frac{\Delta q^2}{96} \frac{\partial u}{\partial q}$$

В дифференциальном приближении (2.26) наиболее важную роль играют члены в правой части уравнения со второй и третьей производными, характеризующие соответственно диссипацию и дисперсию разностной схемы. Коэффициенты α и β , стоящие соответственно перед второй и третьей

производной, зависят от параметров адаптации. Это означает, что диссипация и дисперсия разностных схем зависят от способа адаптации и могут быть изменены в нужную сторону. Коэффициент β явным образом зависит от функции Q . При выборе функции Q из требования квазистационарности коэффициент β обращается в ноль.

$$Q = - \left(u - \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\mu}{\psi} \right) \right) \quad (2.27)$$

Аналогичный анализ для двухслойной схемы ранее был выполнен в работах [56], [73], [89].

2.8. Аналитическое решение

Для сравнения качества разностных схем воспользуемся аналитическим решением.

В работах [177-179] показано, что если функция $\theta(x, t)$ является решением линейного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}, \quad (2.28)$$

то в результате преобразования

$$u(x, t) = - \frac{2\mu}{\theta(x, t)} \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (2.29)$$

полученная функция $u(x, t)$ является решением уравнения Бюргерса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Используя подход, приведенный в работе [179], было построено решение для начального условия

$$u_0(x) = \sin(2\pi x) + 0.5 \sin(\pi x), \quad x \in [0, 1] \quad (2.30)$$

и граничных условий

$$u(0, t) = u(1, t) = 0$$

Применяя обратное преобразование $\theta(x, t) = C \exp \left[- \frac{1}{2\mu} \int_0^x u(\xi, t) d\xi \right]$

получаем начальное условие для уравнения теплопроводности (2.28)

$$\theta_0(x) = C \exp \left[\frac{1}{4\pi\mu} (\cos(2\pi x) + \cos(\pi x) - 2) \right] = C \exp \left[\frac{1}{2\pi\mu} \left(\left(\frac{1}{4} + \cos(\pi x) \right)^2 - \left(\frac{5}{4} \right)^2 \right) \right] \quad (2.31)$$

Далее, решая уравнение теплопроводности с помощью метода разделения переменных с начальными условиями (2.31), получаем решение в форме ряда:

$$\theta(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n \exp[-\mu(\pi n)^2 t] \cos(\pi n x) \quad , \quad a_n = \int_0^1 \theta_0(x) \cos(\pi n x) dx$$

Подставив это выражение в (2.29) получим аналитическое выражение в форме отношения бесконечных рядов:

$$u(x, t) = -\frac{2\mu}{\theta(x, t)} \frac{\partial \theta}{\partial x} = 2\pi\mu \frac{\sum_{n=-\infty}^{+\infty} n a_n \exp[-\mu(\pi n)^2 t] \sin(\pi n x)}{\sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n \exp[-\mu(\pi n)^2 t] \cos(\pi n x)} \quad (2.32)$$

Решение уравнения Бюргера с соответствующим начальным условием достигается посредством вычисления конечных сумм с требуемой точностью.

Начальное условие задаётся в несколько видоизменённой форме:

$$u_{k0}(x) = k(\sin(2\pi x) + 0.5 \sin(\pi x))$$

где k – масштабирующий коэффициент, позволяющий получать желаемое значения малого параметра μ для аналитического решения. Значение $\mu = 10^{-3}$ достигается при величине коэффициента $k=0.125$. Отметим, что подобное решение уравнения было получено в работе [180].

Сравнение пространственного распределения функции $u(x)$ в различные моменты времени для трёхслойной схемы с динамической адаптацией и аналитического решения для $\mu = 10^{-3}$ представлено на Рис.5. Для двухслойной схемы сравнение выглядит аналогично. Пространственный профиль функции $\psi(x)$ представлен на Рис.6. Но при этом, как было показано, метод динамической адаптации позволяет решать задачу и при более маленьких μ , вплоть до $\mu = 10^{-6}$ не теряя качества решения.

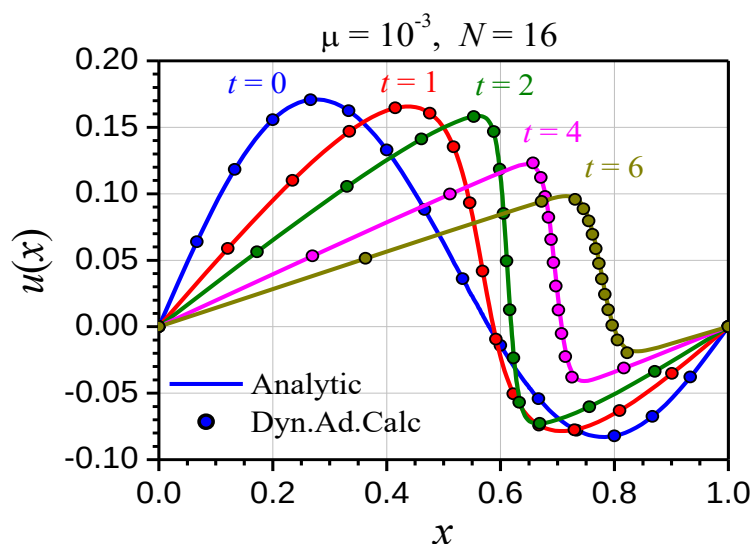


Рис.5. Пространственное распределение функции $u(x)$ в различные моменты времени для трёхслойной схемы с динамической адаптацией (точки) и аналитическое решение (сплошная линия) для $\mu = 10^{-3}$ в моменты времени $t_{1-4} = 0, 1, 2, 4, 6$; $N = 16$.

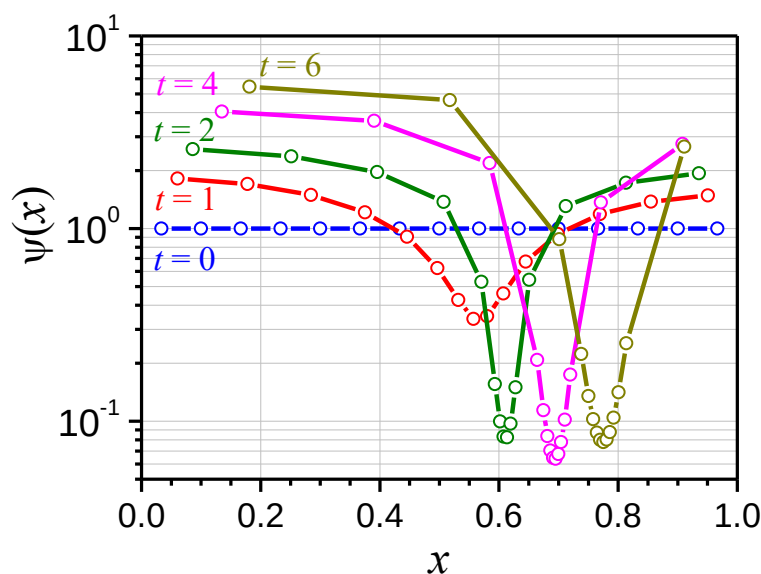


Рис.6. Пространственное распределение функции $\psi(x)$ для трёхслойной схемы с динамической адаптацией для $\mu = 10^{-3}$ в моменты времени $t_{1-4} = 0, 1, 2, 4, 6$; $N = 16$.

2.9. Анализ и сравнение результатов расчетов на динамической сетке с применением двух- и трехслойных схем.

Численное решение задачи (2.15)-(2.16) в диапазоне значений параметра $\mu \in (10^{-3} \div 10^{-6})$ осуществлялось с помощью двух и трёхслойных разностных схем (2.21), (2.22) и (2.23) – (2.25). Все расчеты проводились на адаптирующихся сетках с одинаковым количеством узлов. Для достижения той же точности, что и

при использовании сеток с фиксированными узлами количество узлов на адаптирующихся сетках $N = 25$ оказалось на 2 порядка меньше. На Рис.7, 8 показаны пространственные профили сеточных функций $u(x)$ и $\psi(x)$ на 4 момента времени $t_0 - t_3$ для $\mu = 10^{-4}$. Результаты расчётов по двухслойной (2.21), (2.22) и трёхслойной (2.23) – (2.25) схемам показали, хорошее совпадение между собой и точным решением. Профили функции $u(x)$ полностью свободны от паразитных колебаний.

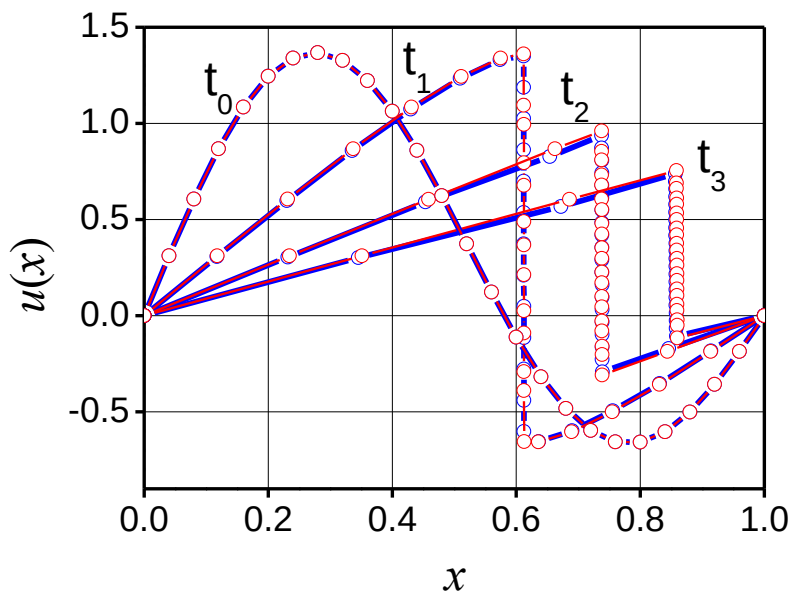


Рис.7. Пространственное распределение функции $u(x)$ в различные моменты времени для двухслойной (синяя линия с маркерами) и трёхслойной (красная линия с маркерами) схем, для $\mu = 10^{-4}$ в моменты времени $t_{0-3} = 0, 0.25, 0.63, 1$; $N = 25$.

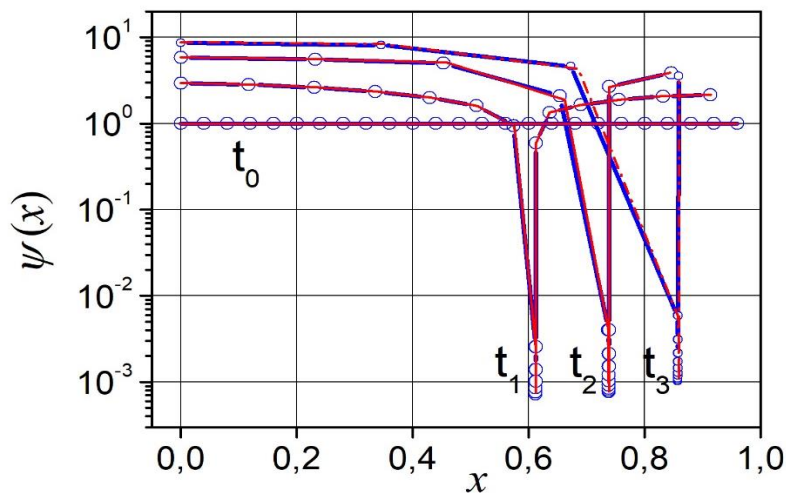


Рис.8. Пространственное распределение функции $\psi(x)$ в различные моменты времени. для двухслойной (синяя линия с маркерами) и трёхслойной (красная линия с маркерами) схем, для $\mu = 10^{-4}$ в моменты времени $t_{0-3} = 0, 0.25, 0.63, 1$; $N = 25$

При этом трёхслойная схема (2.23) – (2.25) не содержит процедуры монотонизации. Как и в случае использования двухслойной схемы в трёхслойной схеме улучшение качества решения достигается за счёт управляемого распределения узлов сетки, движение которых полностью согласовано с искомым решением.

Динамика распределения узлов сетки в физическом пространстве $\Omega_{x,t}$ с переменными (x, t) характеризуется функцией $\psi(x)$, *Рис.8*. Функция $\psi(x)$, представляющая собой отношение $\psi(x) \approx \Delta x / \Delta q$, и с учётом того, что Δq не меняется со временем, характеризует собой безразмерный пространственный шаг сетки в пространстве $\Omega_{x,t}$. Функция $\psi(x)$ показывает на сколько изменяется в каждый момент времени пространственный шаг сетки $\Delta x(t)$.

Пространственные профили $u(x)$ и $\psi(x)$ свидетельствуют о плавном сгущении узлов сетки в область фронта функции $u(x)$, что соответствует уменьшению шага сетки на 3 порядка, *рис. 8*, при одновременном увеличении шага сетки в 2-9 раз в области медленного изменения решения. Но при этом шаг интегрирования по времени для трехслойной схемы оказывается в 2-4 раза меньше по сравнению с шагом для двухслойной схемы Кранка-Николсона. Динамика изменения шага интегрирования по τ приведена на *Рис. 9*.

Благодаря полной согласованности с искомым решением динамическая адаптация оказалась более тонким и гибким механизмом уменьшения погрешности аппроксимации разностных схем по сравнению с методом нелинейной монотонизации. Таким образом, метод динамической адаптации существенно снижает требование к качеству разностных схем с сохранением высокой точности решения.

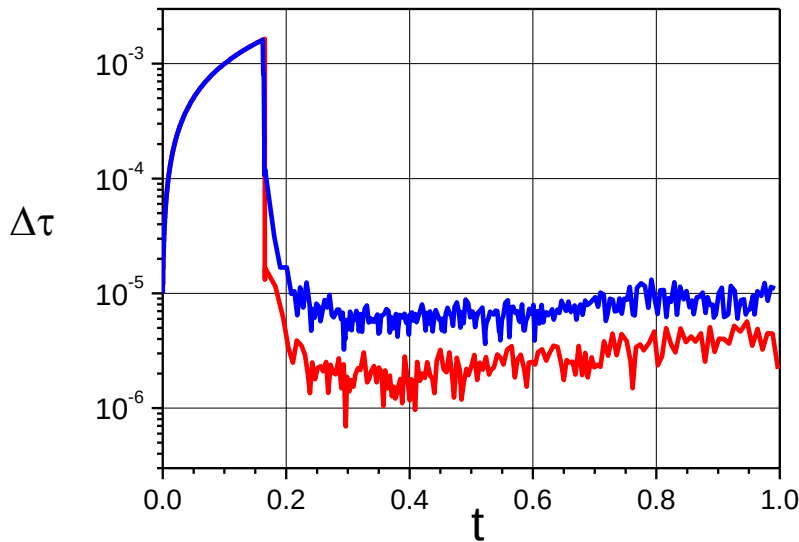


Рис. 9. Динамика изменения шага интегрирования с течением времени. (Синим цветом обозначен шаг для двухслойной схемы Кранка-Николсона. Красным цветом обозначен шаг для трехслойной схемы.)

2.10. Заключение

Построены семейства двухслойных и трёхслойных разностных схем 2-го порядка для полного уравнения Бюргерса в неподвижной эйлеровой и произвольной нестационарной системах координат.

Разработан вычислительный алгоритм и создан программный комплекс на языке C++ для решения уравнения Бюргерса.

Моделирование с последующим анализом его результатов показало, что в стационарной системе координат качество численного решения существенно зависит от качества применяемой конечно – разностной аппроксимации исходного уравнения.

Применение сформулированных в эйлеровой системе координат двухслойной схемы типа Кранка - Николсона и трёхслойной разностной схемы типа Cabaret со вторым порядком аппроксимации показало, что двухслойные разностные схемы дают решение значительно худшего качества по сравнению с трёхслойными разностными схемами типа Cabaret.

Основным недостатком трехслойных разностных схем является наличие в области больших градиентов трудно устранимого отклонения численного решения от точного. В рассматриваемой модельной задаче Бюргерса

несовпадение с точным решением проявляется в явном отставании вычисленного фронта решения от точного. Отставание вызвано процессом принудительной монотонизации решения, которая необходима для устранения дисперсии. Это обстоятельство стимулирует поиски других способов уменьшения погрешности аппроксимации.

Использование нестационарных систем координат позволяет изменять погрешность аппроксимации по ходу решения, управляя движением узлов сетки, в отличие от стационарных систем координат, в которых погрешность аппроксимации определяется изначальной структуры разностной схемы. Применение произвольной нестационарной системы координат позволило создать универсальный метод динамической адаптации для широкого класса задач математической физики, в котором распределение узлов зависит и контролируется искомым решением. Это позволяет автоматически подстраивать расчетную сетку таким образом, что погрешность аппроксимации оказывается минимальной практически независимо от качества исходной разностной схемы. Численное решение нелинейного уравнения Бюргерса с помощью двух и трехслойной разностных схем на динамически адаптирующейся сетке показало фактически полное совпадение расчётов между собой, хорошее совпадение с точным решением при полном отсутствии осцилляций в решении. Расчетная сетка содержала при этом количество узлов ($N = 25$) на два порядка меньше по сравнению с сеткой с фиксированными узлами.

Динамическая адаптация сеток является самостоятельным, гибким и наиболее точным способом уменьшения погрешности аппроксимации, в частности в проблемах конвекции–диффузии с доминирующим механизмом конвекции.

ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ КОРТЕВЕГА-ДЕ ВРИЗА НА СТАЦИОНАРНОЙ И ПОДВИЖНОЙ СЕТКЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДВУХСЛОЙНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ.

3.1. Введение

Уравнение КдВ представляет собой важный инструмент изучения нелинейных волн, поэтому способ построения оптимальной технологии решения данного уравнения в различных условиях остается актуальным.

В первой части данной главы представлено численное и аналитическое исследование семейства двухслойных разностных схем на эйлеровой сетке для уравнения КдВ, включающее в себя как явную, так и неявные схемы. Вторая часть главы посвящена применению подвижных сеток с динамической адаптацией [56] для уравнения КдВ.

3.2. Постановка задачи

Классическое уравнение Кортевега – де Вриза (КдВ) имеет следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha u \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \quad t > 0, \quad -\infty < x < +\infty \quad (3.1)$$

По общепринятой терминологии второй член в уравнении (3.1) называют нелинейным, а третий - дисперсионным. В целом уравнение КдВ описывает эволюцию слабо нелинейных длинноволновых возмущений в среде с дисперсией в области высоких частот.

Воспользовавшись спектральным подходом [185], можно показать, что дисперсия, как и диссипация, может препятствовать опрокидыванию волны. Физически это связано с тем, что различные спектральные компоненты распространяются с различными скоростями, что ограничивает накопление нелинейных эффектов, которые приводят к появлению бесконечно быстрых изменений профиля. Уравнение Кортевега – де Вриза имеет несколько классов решений: квазисинусоидальные колебания малой амплитуды, кноидальные волны и солитонные решения. Большой интерес представляет солитонное решение, которое образуется, когда нелинейный член в уравнении (3.1) уравнивается дисперсионным:

$$\alpha \frac{u^2}{2} \sim \beta u_{xx}$$

и представляет собой стационарный бегущий однополярный импульс [183]

$$u(x, t) = \frac{A}{ch\left[\frac{(x-x_0-vt)}{\delta}\right]^2} \quad (3.2)$$

с амплитудой $A = \frac{3V}{\alpha}$, полушириной $\delta = \sqrt{\frac{4\beta}{V}}$ на уровне $0.42A$, движущийся в направлении оси X со скоростью V . В дальнейшем именно солитонное решение (3.2) будет использоваться в качестве начального условия.

В случае преобладания нелинейного члена, начальное возмущение эволюционирует в группу солитонов, количество которых зависит от конкретного вида начального условия. Если преобладает дисперсионный член, то начальное возмущение тоже эволюционирует в солитон, но при этом образуются кноидальные волны – квазипериодические решения уравнения КдВ [184].

С учетом граничных и начальных условий задача о распространении солитона формулируется следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha u \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (3.3)$$

$$t > 0, -\infty < x < +\infty$$

Начальное условие: $t = 0: u(x, 0) = \frac{A}{ch\left[(x-x_0)/\delta\right]^2} \quad (3.4)$

Граничные условия: $x = 0: \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$; $x = x_R: u = 0, \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$

Для исследования транспортных свойств была выбрана достаточно большая расчетная область $[0, x_R]$, исключаяющая влияние границ на решение.

Целью данной главы является исследование транспортных свойств схем, в связи с этим в постановке задачи в качестве начального условия был выбран конкретный солитон.

3.3. Конечно-разностное представление уравнения КдВ на эйлеровой сетке.

В пространстве переменных $\Omega_{(x,t)}$ строим разностную равномерную по x сетку

$$\omega_{\Delta x}^{At} = \{ (x_m, t^k): x_{m+1} = x_m + \Delta x, t^{k+1} = t^k + \Delta t^k, m = 0, \dots, M, k = 0, \dots, K \} \quad (3.6)$$

на которой определяется сеточная функция $u_m^k \equiv u(x_m, t^k)$.

На сетке (3.6) может быть построена следующая конечно-разностная аппроксимация уравнения (3.1):

схема типа Кранка-Николсона

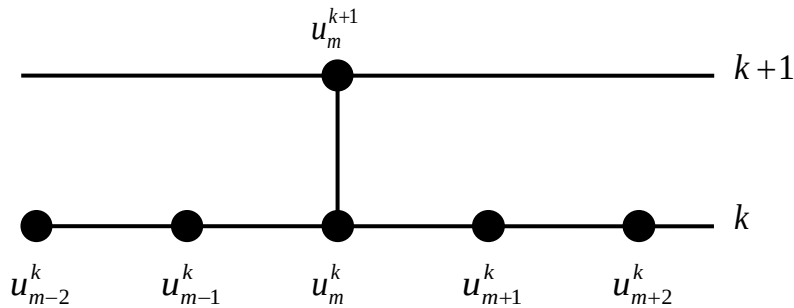
$$\frac{u_m^{k+1} - u_m^k}{\Delta t} + \frac{\alpha}{\Delta x} \left(\frac{(u_{m+1}^{k+\sigma} - u_m^{k+\sigma})^2}{8} - \frac{(u_m^{k+\sigma} - u_{m-1}^{k+\sigma})^2}{8} \right) + \beta \frac{u_{m+2}^{k+\sigma} - 2u_{m+1}^{k+\sigma} + 2u_{m-1}^{k+\sigma} + u_{m-2}^{k+\sigma}}{2\Delta x^3} = 0 \quad (3.7)$$

где $u_m^{k+\sigma} = (1 - \sigma)u_m^k + \sigma u_m^{k+1}$, σ – весовой коэффициент, который определяет степень “неявности” разностной схемы, его значения задаются в пределах от 0 для полностью явной до 1 для полностью неявной схемы.

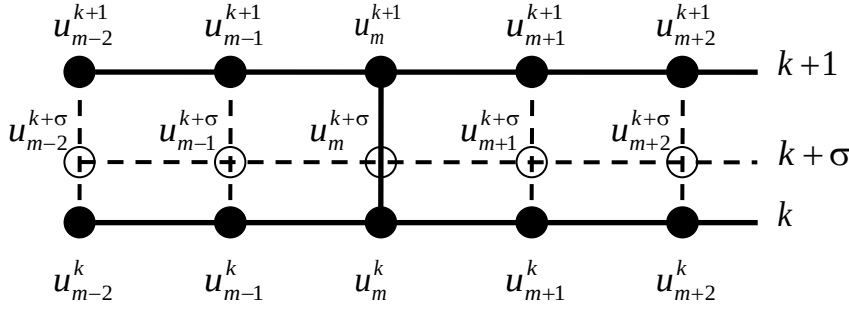
Здесь реализован 2-ой порядок аппроксимации по пространству как первой, так и третьей производных.

Для всех значений $\sigma \neq 0.5$ схема (3.7) имеет 1-й порядок аппроксимации по времени. При $\sigma = 0.5$ выражение (3.7) представляет собой неявную разностную схему Кранка-Николсона со вторым порядком аппроксимации по времени. На Рис.1 показаны сеточные шаблоны для разных значений σ .

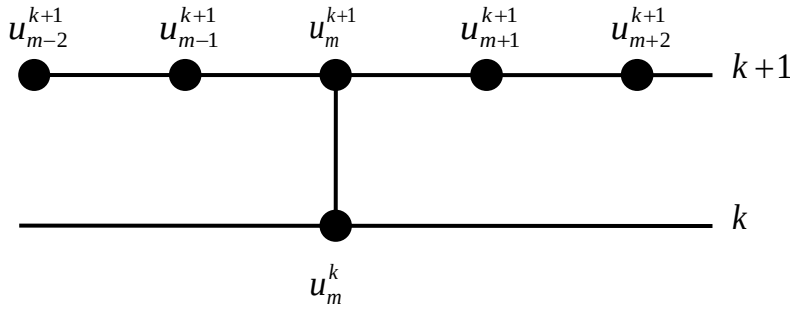
Разностная аппроксимация (3.7), примененная к внутренним точкам расчетной области, порождает систему нелинейных уравнений относительно величин u^{k+1} на новом временном слое. Эта система решается на каждом шаге по времени итерационным методом Ньютона, для чего выполняется процедура ее линеаризации, после которой она преобразуется в линейную систему уравнений с 5-диагональной (ленточной) матрицей. В единственном случае $\sigma = 0$ матрица вырождается в единичную, а схема становится явной.



(a) $\sigma = 0$, т.е. $u^{k+\sigma} = u^k$ (явная схема)



(б) $0 < \sigma < 1$. Полые кружки представляют фиктивные узлы на промежуточном временном слое $(k + \sigma)$.



(в) $\sigma = 1$, т.е. $u^{k+\sigma} = u^{k+1}$ (неявная схема)

Рис.10. Сеточные шаблоны, реализуемые схемой (5) для разных значений σ

3.4. Численное решение уравнения КдВ на эйлеровой сетке с использованием двухслойных разностных схем.

Используем следующие параметры для численного тестирования:

- параметры уравнения: $\alpha = 6$, $\beta = 1$;
- параметры начального условия (Рис.11а) – солитона (3.4): $x_0 = 10$, $Q = 4 \Rightarrow A = 2$, $\delta = 1$;
- размер расчетной области $L = 420$, количество интервалов расчетной сетки $M = 2100$, т.е. величина пространственного шага $\Delta x = 0.2$, и на ширине солитона 2δ укладывается 10 интервалов;
- для неявных схем $\sigma \neq 0$ реализуем механизм автоматического выбора шага по времени, основанный на следующих параметрах: максимально допустимое число итераций на каждом шаге по времени равно 3, критерий сходимости итерационного процесса включает в себя относительную и абсолютную ошибки, значения которых принимаем равными 10^{-9} . Для явной схемы ($\sigma = 0$) шаг по времени обсудим отдельно ниже.

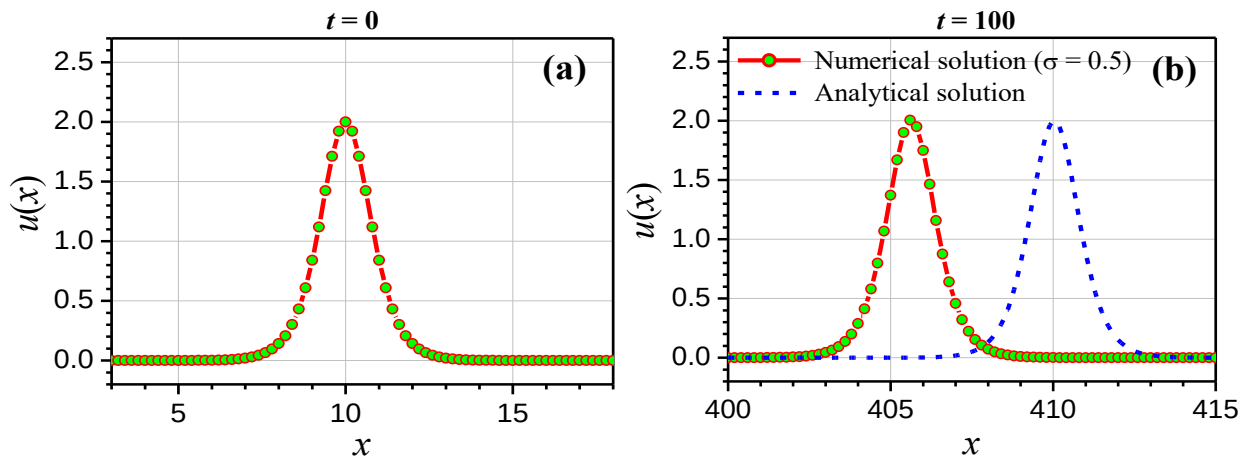


Рис.11. Начальное условие (a) и сравнение численного решения схемой

Кранка-Николсона ($\sigma = 0.5$) с аналитическим на момент времени $t = 100$ (b).

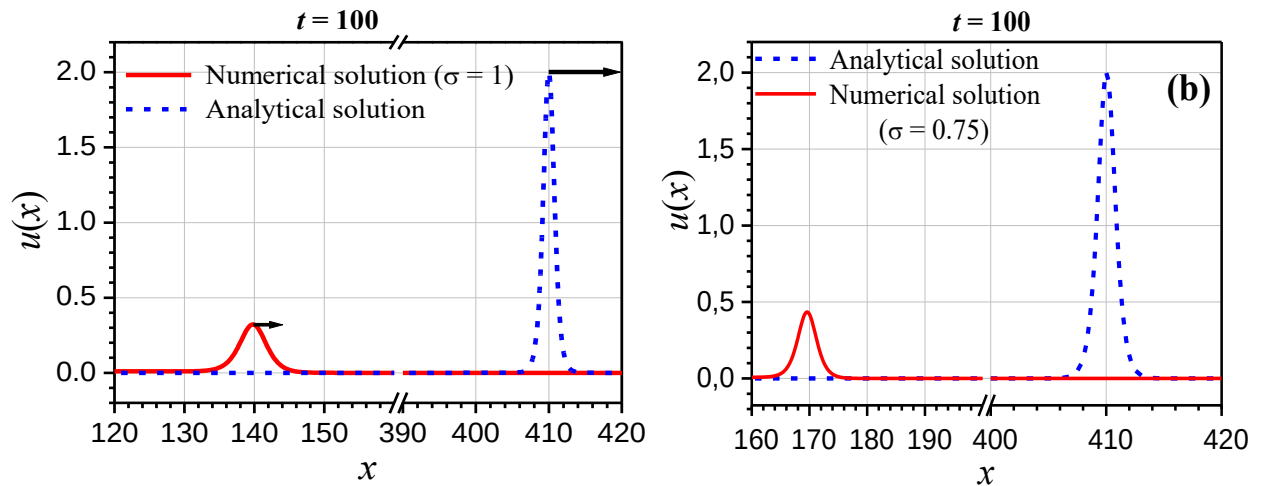


Рис.12. Сравнение численного решения (a) с использованием полностью неявной схемы ($\sigma=1$) с аналитическим на момент времени $t = 100$, (b) с использованием схемы с $\sigma=0.75$ с аналитическим на момент времени $t = 100$.

На Рис.11b показано решение с использованием схемы Кранка-Николсона ($\sigma = 0.5$) на момент времени $t = 100$, когда солитон сместился из начального положение на расстояние 400δ . Скорость переноса, определенная из численного решения, оказалась меньше аналитического значения. Отставание на этом интервале времени составило примерно 4δ . При этом амплитуда солитона колеблется вокруг среднего значения со стандартным отклонением 0.3% , а само среднее значение всего на 0.011% больше аналитического (Рис.13a). То есть можно утверждать, что численное решение с хорошей точностью сохраняет амплитуду солитона в течение всего процесса счёта. Шаг по времени в течение

всего вычислительного процесса колебался с малой амплитудой вокруг постоянного значения $\Delta t = 0.0174$ (Рис.13b). Эти малые колебания были связаны с организацией механизма автоматического выбора шага.

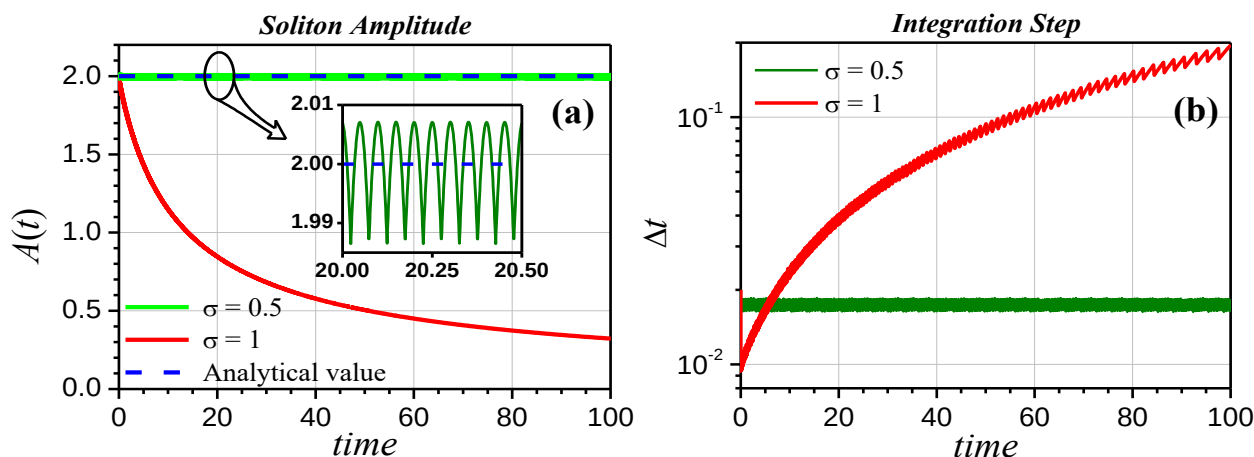


Рис.13. Амплитуда солитона от времени (a) и автоматически выбираемый шаг интегрирования (b) для двух неявных схем: $\sigma = 0.5$ и 1.

Решение с использованием полностью неявной схемы ($\sigma = 1$) приводит к существенно худшим результатам (Рис.12a). Это обусловлено большой схемной вязкостью, которая в этом случае является причиной сильного падения амплитуды солитона со временем, что в свою очередь существенно уменьшает его скорость (Рис.13a). При этом по мере падения амплитуды шаг интегрирования растет (Рис.13b). Однако, в начальные моменты времени, когда амплитуда еще не сильно отличается от начального значения, шаг по времени оказывается примерно в 2 раза меньше, чем для схемы Кранка-Николсона.

На (Рис.12b) представлен промежуточный пример ($\sigma = 0.75$) между полностью неявной разностной схемой и схемой Кранка-Николсона. Здесь также в связи с большой схемной вязкостью по своим характеристикам данный случай оказался схожим со случаем полностью неявной разностной схемы.

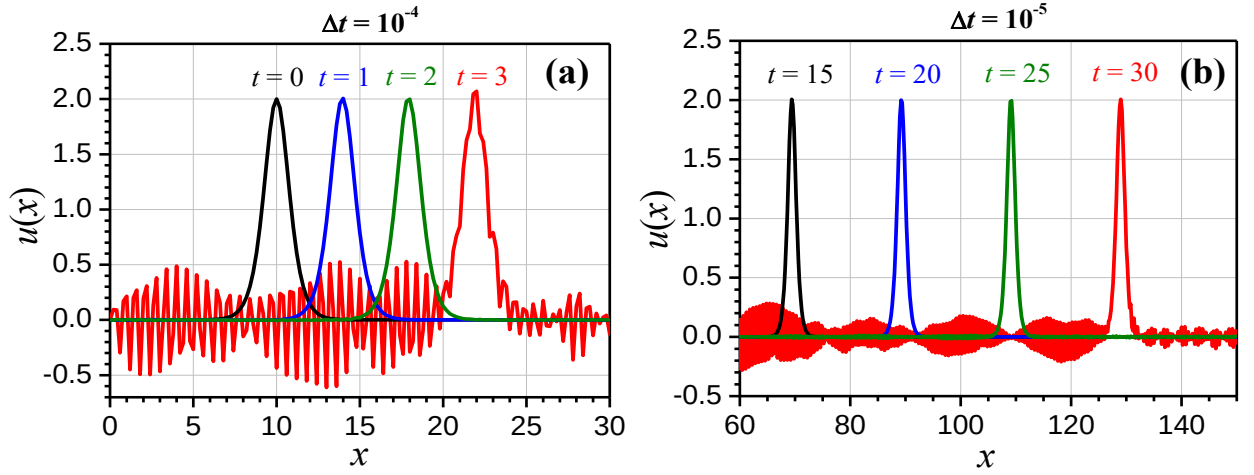


Рис.14. Численное решение с использованием явной разностной схемы ($\sigma = 0$) с отличающимися на порядок шагами интегрирования.

На Рис.14 показано численное решение с использованием явной разностной схемы ($\sigma = 0$). На рисунке (a) представлено решение с шагом по времени $\Delta t = 0.0001$. К моменту времени $t = 3$ происходит потеря устойчивости и дальнейшее решение становится невозможным. Отметим, что уменьшение шага интегрирования отодвигает во времени момент потери устойчивости. Так уменьшение шага в 2 раза до $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5}$ приводит к тому, что разрушение решения наступает ко времени примерно $t = 6$. А на рисунке (b) показана потеря устойчивости ко времени $t = 30$ при интегрировании с шагом $\Delta t = 1 \cdot 10^{-5}$. Как получено в теоретической работе [146] явные двухслойные разностные схемы для уравнения КдВ являются абсолютно неустойчивыми. Наши результаты полностью согласуются с этим выводом.

3.5. Аналитическое исследование.

Выполним анализ семейства схем (3.7) с использованием его дифференциального приближения. Для этого вначале заменим искомую функцию $u(x,t)$ на $f(x,t) = \alpha \cdot u(x,t)$. Это позволяет избавиться от коэффициента α как в исходном уравнении

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{f^2}{2} \right) + \beta \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} = 0 \quad (3.8)$$

так и в конечно-разностной аппроксимации

$$\frac{f_m^{k+1} - f_m^k}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{(f_{m+1}^{k+\sigma} + f_m^{k+\sigma})^2}{8} - \frac{(f_m^{k+\sigma} + f_{m-1}^{k+\sigma})^2}{8} \right) + \beta \frac{f_{m+2}^{k+\sigma} - 2f_{m+1}^{k+\sigma} + 2f_{m-1}^{k+\sigma} - f_{m-2}^{k+\sigma}}{2\Delta x^3} = 0 \quad (3.9)$$

То есть, коэффициент α является просто масштабирующим ось ординат.

Далее разложим двумерную функцию $f(x, t)$ в ряд Тейлора в точке $(x_m, t^{k+1/2})$ и подставим в схему (3.9). Оставляя в полученном выражении члены не выше второго порядка малости, можем написать

$$\begin{aligned} f_t' + f \cdot f_x' + \beta f_{xxx}''' = & - \left[f \cdot f_{xt}^{(II)} + f_t' f_x' + \beta f_{xxx}^{(IV)} \right] \left(\sigma - \frac{1}{2} \right) \Delta t - \\ & - \left[\frac{1}{8} f \cdot f_{xtt}^{(III)} + f_t' f_{xt}^{(II)} \left(\sigma - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{1}{8} f_{tt}'' f_x' + \frac{f_{ttt}'''}{24} + \frac{\beta}{8} f_{xxx}^{(V)} \right] \Delta t^2 - \left[\frac{2}{3} f \cdot f_{xxx}''' + f_x' f_{xx}'' + \beta f_{xxxx}^{(V)} \right] \frac{\Delta x^2}{4} \end{aligned} \quad (3.10)$$

В этом выражении (3.10) для упрощения записи опущены индексы m и $k+1/2$ для функции f и всех ее производных. Сосредоточим внимание на слагаемом 1-го порядка по Δt . С помощью исходного уравнения (3.8) избавимся от производных по времени:

$$\begin{aligned} f_t' &= -f \cdot f_x' - \beta f_{xxx}''' \\ f_{xt}'' &= \frac{\partial}{\partial x} (-f \cdot f_x' - \beta f_{xxx}''') = -(f_x')^2 - f \cdot f_{xx}'' - \beta f_{xxxx}^{(IV)} \\ f_{xxx}^{(IV)} &= -3(f_{xx}'')^2 - 4f_x' f_{xxx}''' - f \cdot f_{xxxx}^{(IV)} - \beta f_{xxxxx}^{(VI)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Кроме того, для упрощения воспользуемся ограниченностью функции f и всех ее производных в области определения, и заменим коэффициенты при слагаемых 2-го порядка на константы K_1 K_2 . В результате окончательно получаем:

$$\begin{aligned} f_t' + f \cdot f_x' + \beta f_{xxx}''' &= K_1 \Delta x^2 + K_2 \Delta t^2 + \\ &+ \Delta t \left(\sigma - \frac{1}{2} \right) \left[\left\{ f^2 f_{xx}'' + 2\beta f \cdot f_{xxxx}^{(IV)} + \beta^2 f_{xxxxx}^{(VI)} + 3\beta (f_{xx}'')^2 \right\} + \left\{ 2f \cdot (f_x')^2 + 5\beta f_x' f_{xxx}''' \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

Теперь проанализируем полученное выражение (3.12). В слагаемом 1го порядка по Δt квадратные скобки содержат две группы членов: в 1ой фигурной скобке четные производные по x , во 2ой – нечетные. Т.е. 1я фигурная скобка отвечает схемную вязкость, а 2я – за схемную дисперсию. При этом знак коэффициента перед дисперсионными членами не существен, в то время как перед диффузионными очень важен. Этот знак определяется разностью $(\sigma - 1/2)$.

Когда $\sigma > 1/2$, коэффициент перед диффузионными членами 1-го порядка положителен, и схема (3.11) реализует уравнение (3.10) с дополнительной

вязкостью, пропорциональной 1ой степени шага по времени. Это обеспечивает с одной стороны устойчивое поведение в процессе решения, с другой стороны – искажение решения, со временем начальное возмущение размазывается. Именно этот эффект мы наблюдали при численном решении с использованием полностью неявной схемы $\sigma = 1$ (см. Рис.12).

Когда $\sigma < 1/2$, коэффициент перед диффузионными членами 1-го порядка отрицателен. То есть уравнение (3.12) получает отрицательную вязкость. А это означает, что схема (3.9) становится абсолютно неустойчивой. И поскольку абсолютное значение коэффициента по-прежнему пропорционально 1ой степени шага по времени, то разрушение решения происходит тем раньше, чем больше шаг по времени. Именно это мы наблюдали при экспериментировании с явной разностной схемой (см. Рис.14).

Кроме того, теперь утверждение из теоретической работы [146] об абсолютной неустойчивости явных двухслойных разностных схем для уравнения КдВ может быть расширено для семейства схем (3.9): абсолютно неустойчивы все схемы (3.9) при $\sigma < 1/2$, т.е. при “любом преобладании явности”.

Выделенным значением σ является $1/2$. При этом единственном значении слагаемое 1го порядка в (3.12) обращается в ноль, и, таким образом, схема (3.9) получает 2ой порядок аппроксимации по обеим переменным. Кроме того, гаснут эффекты схемной вязкости и дисперсии 1-го порядка. Именно благодаря этому при численном решении удавалось получать перенос солитона без существенных искажений на значительные расстояния (см. Рис.11).

Таким образом, было проведено исследование семейства двухслойных разностных схем для уравнения Кортевега-де-Вриза на эйлеровой разностной сетке.

Численно показано, что наилучшие результаты получаются при использовании неявной разностной схемы Кранка-Николсона ($\sigma = 0.5$) 2-го порядка аппроксимации по времени и пространству.

Полностью неявная двухслойная схема 1-го порядка по времени и 2-го по пространству, хотя и является абсолютно устойчивой, тем не менее из-за большой схемной вязкости существенно искажает решение.

Решение с использованием явной двухслойной схемы ни разу не удалось довести до конца, т.к. всегда наступал момент потери устойчивости, даже при очень малом шаге по времени. Хотя до этого момента решение было вполне приемлемым.

Аналитическое исследование полностью подтвердило результаты численных экспериментов. Кроме того, оно позволило сделать заключение об абсолютной неустойчивости семейства схем (3.9) в случае “преобладания явности” ($\sigma < 1/2$).

При всех достоинствах схемы Кранка-Николсона на эйлеровой сетке происходит достаточно большое отставание от аналитического решения. Во второй части главы применим метод динамической адаптации для решения этой задачи [56].

3.6. Разностная аппроксимация уравнения КдВ в подвижной системе координат

Постановка задачи.

Как было показано метод динамической адаптации позволяет адаптировать сетки к различным особенностям решения, такие как: большие градиенты [89], [73], [56] перемещение границ [75-79] и разрывные решения [54], [63]. В отличие от уравнения Бюргерса, особенностью которого являются большие градиенты, особенностью рассматриваемого уравнения КдВ является наличие солитонного решения, перемещающегося на большие расстояния с постоянной скоростью V . Именно под эту особенность будет происходить подстройка динамически адаптирующейся сетки, используемой для численного решения нелинейного уравнения КдВ.

Пусть (x, t) исходные независимые переменные, определяющие эйлерову систему координат. Переход из физического пространства с независимыми переменными (x, t) , определяющими эйлерову систему координат $\Omega_{x,t}$: $x_0 \leq x \leq x_R, t > 0$ к произвольной нестационарной системе координат с переменными

(q, τ) некоторого расчетного пространства $\Omega_{q,\tau}: q_0 \leq q \leq q_R, \tau > 0$ осуществляется с помощью замены переменных общего вида $x = f(q, \tau)$, $t = \tau$, которой соответствует однозначное невырожденное обратное преобразование $q = \varphi(x, t)$ и $t = \tau$.

Дифференциальные операторы при переходе из одной системы в другую связаны между собой следующим образом:

$$\frac{\partial \cdot}{\partial t} = \frac{\partial \cdot}{\partial \tau} - \frac{Q}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q}; \quad \frac{\partial \cdot}{\partial x} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q}; \quad \frac{\partial^3 \cdot}{\partial x^3} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial \cdot}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad (3.13)$$

где $\psi = \frac{\partial x}{\partial q}$ - метрический коэффициент, $Q = \frac{\partial x}{\partial \tau}$ - функция, в общем случае

зависящая от искомого решения и, имеющая смысл скорости.

Уравнение непрерывности для метрического коэффициента:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \frac{\partial Q}{\partial q}, \quad (3.14)$$

представляющее собой уравнение обратного преобразования.

Тогда с учетом (3.14) уравнение (3.1) в новой системе координат может быть представлено в недивергентной форме совместно с уравнением обратного преобразования

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \frac{(\alpha u - Q)}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{\beta}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \left[\frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} \right) \right] = 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \frac{\partial Q}{\partial q}$$

В дивергентной форме уравнение (3.15) имеет вид

$$\frac{\partial(\psi u)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial q} \left[\alpha \frac{u^2}{2} - Qu \right] + \beta \frac{\partial}{\partial q} \left[\frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\psi} \frac{\partial u}{\partial q} \right) \right] = 0 \quad (3.16)$$

В методе динамической адаптации уравнение в недивергентной форме обычно используется для определения функции Q , а в дивергентной – для построения консервативных разностных схем.

Определим функцию преобразования исходя из принципа квазистационарности [10], согласно которому в недивергентном уравнении (3.15) предполагается выполнение равенства $\partial u / \partial \tau = 0$. В итоге получаем в явной форме выражение для определения скорости Q :

$$Q = \alpha u + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial q^3} / \frac{\partial u}{\partial q} \quad (3.17)$$

Еще раз подчеркнем, что особенностью задачи является перемещение солитона на большие расстояния без изменений с постоянной скоростью. Поэтому в формуле (3.17) принято значение $\psi=1$. Окончательно для определения функции преобразования Q подставим начальное условие (3.4)

$$u(q) = \frac{3V}{\alpha \operatorname{ch}[q\sqrt{V/(4\beta)}]^2},$$

в выражение (3.17). Выполняя необходимое дифференцирование, получим простое равенство $Q=V$, характеризующее собой подвижную систему координат,двигающуюся с постоянной скоростью V .

Уравнение обратного преобразования будем использовать в форме

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = Q$$

Подобное проявление динамической адаптации встречалось в задаче о взаимодействии аннигилирующих импульсов [90].

Окончательная постановка задачи в переменных (q, τ) с учетом всего вышесказанного принимает вид:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \frac{\partial \left(\alpha \frac{u^2}{2} \right)}{\partial q} - \frac{\partial (Qu)}{\partial q} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial q^3} = 0 \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = Q \quad (3.19)$$

$$0 < q < q_R, \quad \tau > 0$$

Граничные и начальные условия:

$$\tau = 0: \quad u(q, 0) = \frac{A}{\operatorname{ch}[(q - q_0)/\delta]^2}$$

$$q = 0: \quad \frac{\partial^2 u}{\partial q^2} = 0, \quad Q(0, \tau) = V$$

$$q = q_R: \quad u = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial q} = 0, \quad Q(q_R, \tau) = V$$

Конечно-разностное представление

В расчетном пространстве $\Omega_{q,\tau}$ рассмотрим вычислительную сетку $\omega_{\Delta q}^{\Delta \tau}$:

$$\omega_{\Delta q}^{\Delta \tau} = \left\{ \left(q_m, \tau^k \right), \left(q_{m+\frac{1}{2}}, \tau^k \right) : q_{m+1} = q_m + \Delta q, \quad q_{m+\frac{1}{2}} = q_m + \frac{\Delta q}{2}, \right. \\ \left. \tau^{k+1} = \tau^k + \Delta \tau, \quad m = 0, \dots, N; \quad k = 0, \dots, K \right\} \quad (3.20)$$

При этом функции x_m^k, u_m^k относятся к целым узлам сетки.

На сетке (3.20) запишем семейства разностных схем для уравнений (3.18), (3.19) в виде:

$$\left(u_m^{k+1} - u_m^k \right) - Q \frac{\Delta \tau}{\Delta q} \left(u_{m+1/2}^{k+\sigma} - u_{m-1/2}^{k+\sigma} \right) + \alpha \frac{\Delta \tau}{\Delta q} \left(\frac{\left(u_{m+1/2}^{k+\sigma} \right)^2}{2} - \frac{\left(u_{m-1/2}^{k+\sigma} \right)^2}{2} \right) + \\ + \frac{\beta}{2} \frac{\Delta \tau}{\Delta q^3} \left(u_{m+2}^{k+\sigma} - 2u_{m+1}^{k+\sigma} + 2u_{m-1}^{k+\sigma} - u_{m-2}^{k+\sigma} \right) = 0 \\ x_m^{k+1} = x_m^k + Q \Delta \tau \quad (3.21)$$

Где $u_{m-1/2} = \frac{u_m + u_{m-1}}{2}$, $u_m^{k+\sigma} = (1-\sigma)u_m^k + \sigma u_m^{k+1}$, σ - весовой множитель, определяющий степень неявности разностной схемы.

При всех значениях $\sigma \neq 0.5$ схема (3.21) имеет 1-ый порядок аппроксимации по времени. В случае $\sigma = 0.5$ выражение (3.21) представляет собой неявную схему Кранка-Николсона со 2-м порядком аппроксимации по времени и пространству.

3.7. Вычислительный эксперимент

Для численного тестирования использовались следующие параметры:

- параметры уравнения: $\alpha = 6$, $\beta = 1$;
- параметры начального условия солитона (3.2): $x_0 = 10$, $V = 4$, $A = 2$, $\delta = 1$;
- размер изначальной расчетной области $L = 20$, число узлов $N = 80$, т.е. величина пространственного шага $\Delta q = 0.25$;
- шаг интегрирования выбирался автоматически исходя из заданной точности равной 10^{-9} и максимального числа итераций равного 3.

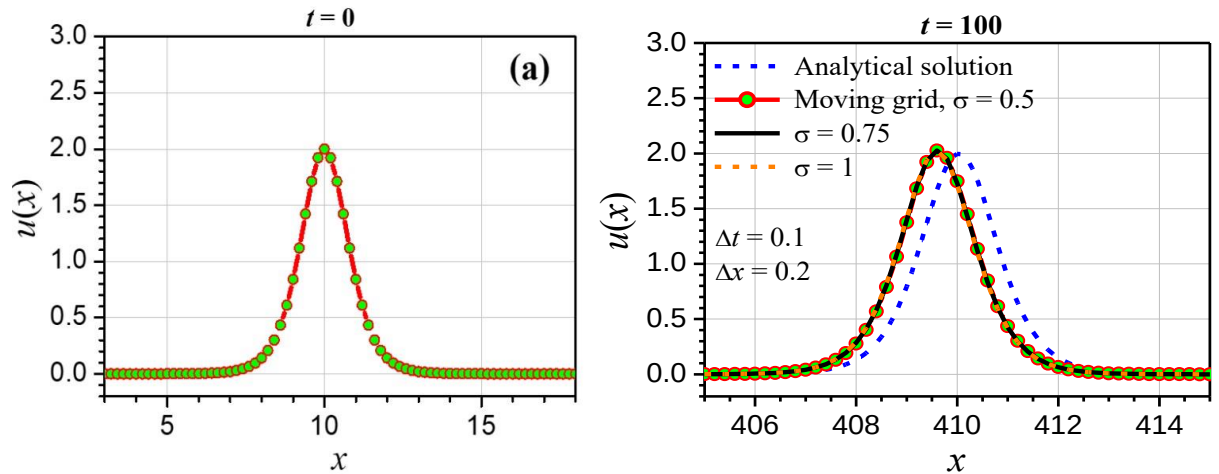


Рис.15. (a) начальное условие ($t=0$); Сравнение численного решения с использованием схемы (3.21) с аналитическим на момент времени $t=100$ при (b) $\sigma=0.5-1$

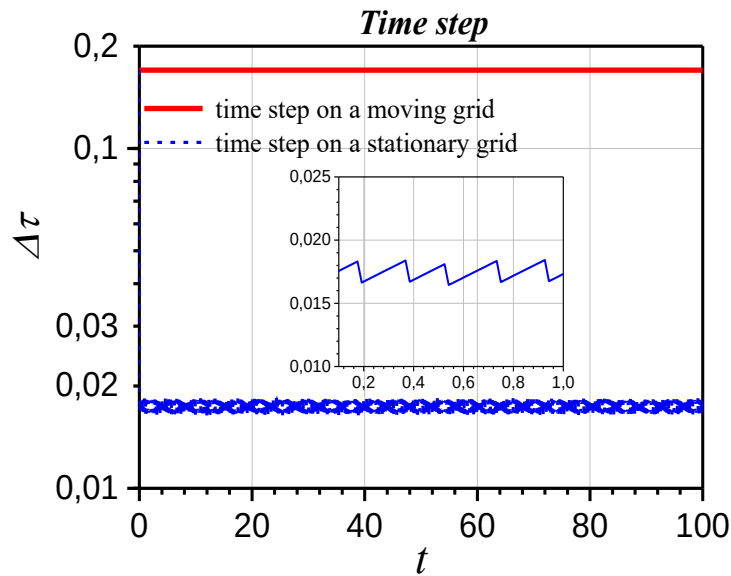


Рис. 16. сравнение шага по времени при использовании схемы (7) на подвижной сетке при $\sigma=0.5$ со схемой типа Кранка-Николсона на стационарной сетке

На Рис.15b показано решение с использованием схемы Кранка-Николсона ($\sigma=0.5$) на момент времени $t=100$, когда солитон сместился из начального положение на расстояние 400δ . Численный эксперимент показал, что, выбирая функцию Q из соотношения (3.2) можно значительно улучшить качество решения. Отставание от аналитического решения составило примерно δ , в то время как на эйлеровой сетке отставание составило $\approx 4\delta$. Таким образом, было показано, что численное решение с гораздо лучшей точностью сохраняет амплитуду солитона в течение всего расчетного времени.

Применение подвижных сеток с динамической адаптацией [63] позволило получить численные решения высокой точности не только для схем Кранка-Николса, но и практически избавиться от дисперсии во всей области неясности двухслойных схем, независимо от степени неясности для семейства схем 1-го порядка по времени t и 2-го по пространству. При этом схемы с преобладанием явности по - прежнему неустойчивы.

Удалось значительно примерно в 8.5 раз увеличить величину шага по времени (Рис. 16).

Таким образом, применение динамической адаптации существенно повышает качество разностных схем и позволяет адаптироваться к совершенно различным особенностям.

3.8. Заключение

На основе метода динамической адаптации построено и численно исследовано семейство двухслойных разностных схем.

Разработан вычислительный алгоритм и создан программный комплекс на языке C++ для решения уравнения Кортевега – де –Вриза.

В отличие от эйлеровых расчетных сеток, где приемлемое решение удалось получить только для схемы Кранка-Николсона, применение подвижных сеток существенно повышает точность решения и даёт возможность получить хорошие результаты в том числе для семейства 2-хслойных схем 1-го порядка по времени t и 2-го по пространству x с преобладанием неясности во всем диапазоне $\sigma \in [0.5, 1]$. При этом шаг по времени на подвижной сетке значительно выше шага на эйлеровой сетке, что в свою очередь приводит к уменьшению времени счета.

ГЛАВА 4. КОНТИНУАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЕТЕРО-ГОМОГЕННОГО ПЛАВЛЕНИЯ И ФРАГМЕНТАЦИИ МЕТАЛЛА УЛЬТРАКОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ.

4.1. Введение

Воздействие интенсивного лазерного излучения на металлы может сопровождаться нагревом, плавлением, испарением [84] и образованием плазмы, [187]. Динамика процессов в конденсированной среде, потоке пара и газовой

среде, окружающей испаряющуюся поверхность, зависит от целого ряда параметров лазерного импульса: уровня поглощаемой интенсивности, длины волны излучения, длительности и пространственно-временного распределения энергии, а также от оптических, теплофизических и гидродинамических характеристик конденсированной и газовой сред. Следует отметить, что процесс взаимодействия качественно зависит от среды, в которую помещена облучаемая мишень (вакуум, газ, пар, жидкость).

Основные особенности мощного лазерного воздействия на металлы связаны с высокой скоростью и объемным способом энерговыделения лазерного излучения в электронной составляющей, что приводит к сильному отклонению системы от состояния локального термодинамического равновесия (ЛТР). Наряду с нарушением термодинамического равновесия, в облучаемом веществе необходимо учитывать кинетическую неравновесность высокоскоростных фазовых переходов [188], сопровождаемых возникновением сильно перегретых метастабильных состояний [189,190]. Мощные потоки вещества через межфазные границы, в совокупности с объёмным распределением энергии в электронной компоненте ($T_e \gg T_i$) способствуют формированию приповерхностных максимумов температуры в твёрдой фазе. Модель также должна учитывать мощные динамические эффекты, связанные с быстрым распространением фазовых фронтов. Учет этих процессов требует явного описания кинетики фазовых переходов и формулировки законов сохранения на фазовых фронтах [191], представляющих собой гидродинамические разрывы.

Данная глава посвящена математическому моделированию процессов гетерогенного плавления с последующей фрагментацией расплава, лежащих в основе неравновесной лазерной абляции металла (Al). Исследование механизмов плавления и фрагментации осуществляется в рамках континуального подхода с использованием неравновесной гидродинамической модели [161], [172].

4.2. Математическая модель

Лазерное излучение распространяется справа налево и, попадая на поверхность металлической мишени, частично поглощается, частично

отражается. Поглощенная энергия расходуется на нагрев, фазовые превращения, генерацию ударных волн в твердой фазе и динамическую фрагментацию мишени со стороны облучаемой поверхности. На *Рис. 17* изображено пространственное положение фаз, подвижных межфазных границ $\Gamma_{sl}(t)$, $\Gamma_{kv}(t)$ и ударной волны в твердой фазе $\Gamma_{sh,s}(t)$.

Математическое описание и моделирование пико- и фемтосекундного лазерного воздействия на металлическую мишень в вакууме осуществляется в рамках нестационарной одномерной по пространству, двухтемпературной многофронтной гидродинамической задачи Стефана, дополненной уравнением переноса лазерного излучения, учитывающей фазовые превращения в двух средах: в твердой – гомогенное и гетерогенное плавление, в жидкой – поверхностное испарение [194, 193]. При этом внутри каждого откола также решается соответствующая система уравнений с условиями сшивки на границах.

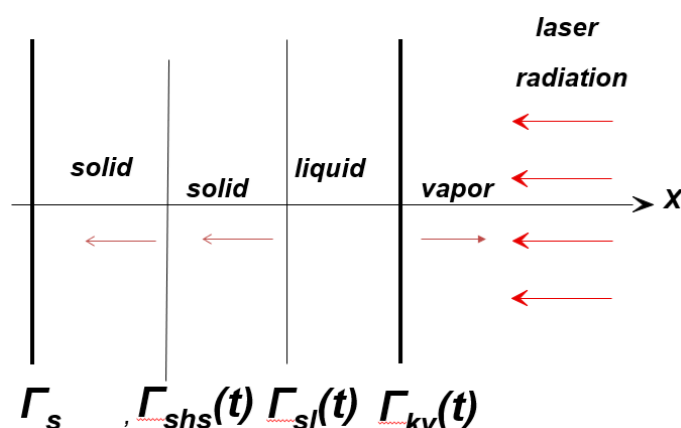


Рис. 17. Схема пространственной конфигурации фаз.

4.3. Система уравнений.

Воздействие мощных лазерных импульсов на металлические мишени, инициируют в них ряд взаимосвязанных процессов с нелинейным характером развития. Описание их поведения осуществляется системой уравнений гидродинамики, двумя уравнениями баланса энергии электронной и ионной подсистем и уравнением переноса лазерного излучения. Система уравнений записывается в области с одной неподвижной Γ_s и тремя подвижными границами $\Gamma_{sh,s}(t)$, $\Gamma_{sl}(t)$, $\Gamma_{kv}(t)$.

Полная математическая формулировка приводится ниже в следующем виде:

$$\left(\begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \\ \rho_e = z \frac{m_e}{m_i} \rho_i \\ \frac{\partial(\rho_e \varepsilon_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_e \varepsilon_e u)}{\partial x} = - \left(P_e \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_e}{\partial x} + g(T_e)(T_e - T_i) + \frac{\partial G}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i u)}{\partial x} = - \left(P_i \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_i}{\partial x} - g(T_e)(T_e - T_i) \right) \\ \frac{\partial G}{\partial x} - \alpha(T_e)G = 0 \end{array} \right)_{k=s,\ell,v} \quad (4.1)$$

$$\text{где - } W_e = -\lambda_e(T_e, T_i) \frac{\partial T_e}{\partial x}, \quad W_i = -\lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial x}, \quad P(\rho, T) = P_e(\rho_e, T_e) + P_i(\rho_i, T_i),$$

$$\rho = \rho_e + \rho_i.$$

Область определения решения:

$$t > 0, \quad [\Gamma_s < x < \Gamma_{sh,s}(t)] \cup [\Gamma_{sh,s}(t) < x < \Gamma_{s\ell}(t)] \cup [\Gamma_{s\ell}(t) < x < \Gamma_{\ell v}(t)]$$

Принятые обозначения: Индексы s, ℓ, v - обозначают принадлежность величин соответственно к твердой, жидкой и паровой фазам, e, i - к электронной и ионной подсистемам. $\rho, u, \varepsilon, T, P$ - плотность, газодинамическая скорость, внутренняя энергия, температура и давление соответственно, z - степень ионизации (для металлов валентность), m_e, m_i - массы электрона и ионна, G - плотность потока лазерного излучения, $\alpha(T_e)$ - коэффициент объёмного поглощения (знак "-" в уравнении для G соответствует направлению распространения лазерного излучения справа налево, т.е. против оси X), $R(T_e)$ - отражательная способность поверхности, $\lambda_e(T_e, T_i), \lambda_i(T_i)$ - электронный и ионный коэффициенты теплопроводности, $g(T_e)$ - электрон-ионный фактор энергообмена, W_e, W_i - тепловые потоки: $W_e = -\lambda_e(T_e, T_i) \partial T_e / \partial x$, $W_i = -\lambda_i(T_i) \partial T_i / \partial x$.

4.4. Уравнение состояния для Al

Электронная подсистема.

В электронной подсистеме уравнения состояния $\varepsilon_e = \varepsilon_e(\rho_e, T_e)$, $p_e = p_e(\rho_e, T_e)$ и плотность электронов не могут быть выражены через интегралы Ферми – Дирака полуцелого порядка $F_{k+1/2}(\eta)$ [192]

$$\varepsilon_e(n_e, T_e) = n_e \langle \varepsilon_e \rangle, \quad p_e(n_e, T_e) = \frac{2}{3} (n_e \langle \varepsilon_e \rangle), \quad \langle \varepsilon_e \rangle = k_B T_e \frac{F_{3/2}}{F_{1/2}}$$

Для вычисления интегралов Ферми – Дирака использовались аппроксимационные приближения

$$F_{1/2}(\xi) = \frac{2}{3} \frac{1}{\xi^{3/2}} \quad F_{3/2}(\xi) = \frac{\left(\xi^2 + \left(\frac{2}{5}\right)^2\right)^{1/2}}{\xi^{5/2}} \quad \text{где} \quad \xi = \frac{k_B T_e}{\varepsilon_F},$$

уравнения состояния $\varepsilon_e = \varepsilon_e(\rho_e, T_e)$, $p_e = p_e(\rho_e, T_e)$ принимают вид

$$p_e(n_e, T_e) = n_e \varepsilon_F(n_e) \sqrt{\left(\frac{k_B T_e}{\varepsilon_F(n_e)}\right)^2 + \left(\frac{2}{5}\right)^2},$$

$$\varepsilon_e(n_e, T_e) = \frac{3}{2} n_e \varepsilon_F(n_e) \sqrt{\left(\frac{k_B T_e}{\varepsilon_F(n_e)}\right)^2 + \left(\frac{2}{5}\right)^2}$$

Ионная подсистема.

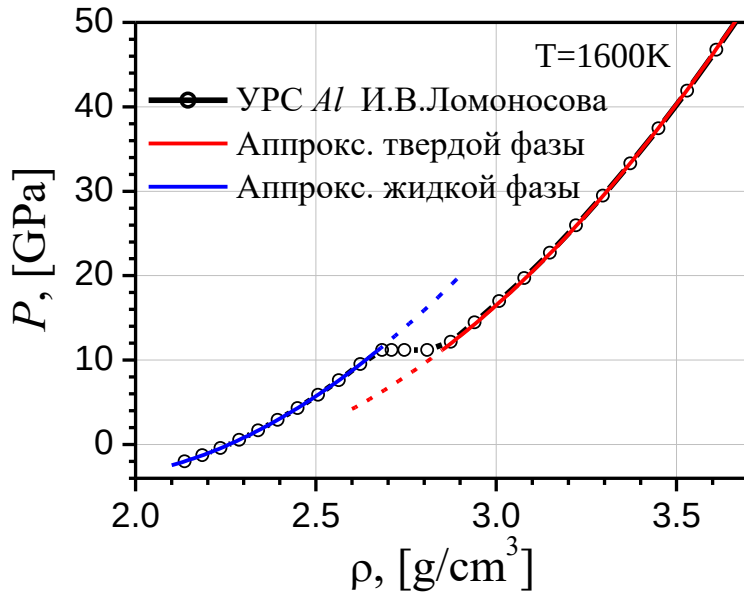


Рис.18. Изотерма 1600K для табличного уравнения Ломоносова и ее аппроксимация полиномами. Пунктирами показана экстраполяция в метастабильные области.

Ионное уравнение состояния определялось с использованием многофазного уравнения Ломоносова [212], представленного в виде таблиц (маркеры – чёрные кружки на Рис.18). На изотермах $P(\rho, T)$ многофазного УРС присутствуют горизонтальные полки, соответствующие равновесным двухфазным состояниям (твёрдое-жидкость, жидкость-пар) – фазовые переходы. Изотермы аппроксимировались отдельными однофазными уравнениями для каждой фазы,

взятыми в виде полиномов. Движение по линии такого полинома за линию фазового перехода позволяет в расчетах зайти в метастабильную область. Такие метастабильные линии отображены на графике *Рис.18* пунктиром. Соответствующим образом разбивались на однофазные области энергетические изотермы $E(p, T)$.

4.5. Краевые условия

В качестве краевых условий используются начальные условия в момент времени $t = 0$ и граничные условия в точках $x = \Gamma_s, \Gamma_{sh,s}(t), \Gamma_{sl}(t), \Gamma_{kv}(t)$.

Начальные условия:

$$t = 0: \quad u(0, x) = 0, \quad p = 0, \quad \rho = \rho_0, \quad T_e = T_i = T_0 = 293\text{K}. \quad (4.2)$$

Граничные условия:

В качестве граничных условий используются следующие соотношения:

1) На левой неподвижной границе $x = \Gamma_s$ используется условие равенства нулю потока массы и тепла:

$$\rho_s u_s = 0, \quad W_s = 0 \quad (4.3)$$

2) **Фронт плавления $x = \Gamma_{sl}(t)$:** В качестве граничных условий на подвижной межфазной границе (фронт плавления) $\Gamma_{sl}(t)$ используется модель гетерогенного плавления – кристаллизации [194, 193, 6], сформулированная в условиях сильного отклонения от состояния локального термодинамического равновесия и состоящего из 3-х законов сохранения – массы, импульса и энергии, записанных в неподвижной (лабораторной) системе координат:

$$\begin{aligned} \rho_s(u_s - v_{sl}) &= \rho_l(u_l - v_{sl}) \\ P_s + \rho_s(u_s - v_{sl})^2 &= P_\ell + \rho_\ell(u_\ell - v_{sl})^2 \\ \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}\right)_\ell - \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}\right)_s &= L_m^{ne} \rho_s(u_s - v_{sl}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$L_m^{ne} = L_m(T_m(P_s)) + (C_{P\ell} - C_{Ps})(T_{sl} - T_m) + \left[\frac{\rho_s + \rho_\ell}{2\rho_\ell\rho_s} - \frac{1 - T_m\alpha_\ell}{\rho_\ell}\right](P_s - P_\ell)$$

Принятые обозначения: $u_s, u_\ell, P_s, P_\ell, \rho_s, \rho_\ell, C_{ps}, C_{p\ell}$, - гидродинамические скорости, давление, плотность, теплоёмкость при постоянном давлении, L_m^{ne} - неравновесная теплота плавления, $\alpha_\ell = -\frac{1}{\rho_\ell} \left(\frac{\partial \rho_\ell}{\partial T} \right)_P$ - коэффициент объемного теплового расширения жидкости, его величина определяется из термического уравнения состояния $P = P_\ell(\rho_\ell, T_\ell)$.

Закон сохранения энергии дополняется зависимостями равновесной температуры плавления от давления $T_m(P_s) = T_0 + kP_s$ и кинетической скорости фронта плавления/кристаллизации от величины перегрева/переохлаждения $\Delta T_{s\ell} = T_{s\ell} - T_m(P_s)$ [188, 189], где $T_m(P_s)$ - равновесная температура плавления, зависящая от давления, L_m - равновесная теплота плавления, $v_{s\ell}, T_{s\ell}$ - скорость фронта и температура плавления/ кристаллизации на подвижной фазовой границе.

В лабораторной системе координат температурная зависимость скорости фронта плавления/кристаллизации в модели с диффузионным ограничением выражается уравнением [190]:

$$V_{s\ell}(\Delta T_{s\ell}) = u_s \pm v(\Delta T_{s\ell}) = u_s \pm \pm D \exp \left[-\frac{A}{kT_{s\ell}} \right] \left\{ \exp \left[\left(\frac{L_m m_i}{k_B T_{s\ell}} + \beta \right) \frac{\Delta T_{s\ell}}{T_m(P_s)} \right] - 1 \right\} \quad (4.5)$$

Уравнение содержит 3 константы D, A, β , две из которых D и A , - размерные, одна β - безразмерная. Их значения определялись с помощью молекулярно-динамического моделирования [189], [190]. Для Al образца: $D = 2.699 \cdot 10^2$ [м/с], $A = 2.251 \cdot 10^{-2}$ [эВ], $\beta = 3.693$.

Предполагается, что электронная компонента при переходе через границу раздела фаз является непрерывной по отношению к тепловому потоку и электронной температуре T_e :

$$\left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right)_s = \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right)_\ell, T_{e,s} = T_{e,\ell}. \quad (4.6)$$

3) Фронт испарения $x = \Gamma_{kv}(t)$: В качестве граничных условий на подвижной межфазной границе $\Gamma_{kv}(t)$ используется модель поверхностного испарения, записанная в приближении Кнудсеновского слоя. Модель состоит из 3-х законов

сохранения и 3-х дополнительных параметров на внешней стороне Кнудсеновского слоя (T_v, ρ_v, u_v). В общем случае два из этих параметров (обычно T_v, ρ_v) определяются с использованием определенных аппроксимационных соотношений, [194], а третий обычно число Маха $M = u_v/u_{sound}$, находится из уравнений газовой динамики. Поскольку в данной работе считается, что испарение происходит в вакуум, то $M=1$.

Три закона сохранения на испаряющейся поверхности, записанные в неподвижной (лабораторной) системе координат имеют вид:

$$\begin{aligned} x = \Gamma_{kv}(t): \quad & \rho_k(u_k - v_{kv}) = \rho_v(u_v - v_{kv}) \\ & P_k + \rho_k(u_k - v_{kv})^2 = P_v + \rho_v(u_v - v_{kv})^2, \\ & \left(-\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}\right)_k = \rho_k(u_k - v_{kv})L_v^{ne} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Выписанные законы сохранения дополняются следующими условиями:

$$\begin{aligned} \rho_v &= \alpha_\rho(M)\rho_{sat}, \quad T_v = \alpha_T(M)T_k \\ P_{sat}(T_k) &= P_b \exp\left[\frac{L_v m_i}{k_B T_k} \left(\frac{\Delta T_k}{T_b}\right)\right] \\ \rho_{sat} &= P_{sat}(T_k) \frac{m_i}{k_B T_k}, \quad \Delta T_k = T_k - T_b, \end{aligned} \quad (4.8)$$

где $k = s, \ell$ - индексы, указывающие на возможность испарения с поверхности твердого тела или жидкости, $\alpha_\rho(M)$, $\alpha_T(M)$ - коэффициенты Крута [195], ρ_{sat} , P_{sat} - плотность и давление насыщенного пара, L_v - равновесная теплота испарения, P_b , T_b - давление и температура кипения при нормальных условиях.

По аналогии с определением неравновесной теплоты плавления L_m^{ne} , определяется неравновесная теплота испарения L_v^{ne} . Энтальпии фаз в этом случае раскладываются в ряд Тейлора в точке $(P_{sat}(T_k), T_k)$ с учётом разрыва температуры на фронте. В результате L_v^{ne} принимает следующее выражение:

$$L_v^{ne} = L_v(T_k) + C_{Pv}(T_v - T_k) + \frac{\rho_k + \rho_v}{2\rho_v\rho_k}(P_k - P_v) - \frac{1 - T_k\alpha_k}{\rho_k}(P_k - P_{sat})$$

Для электронной компоненты и лазерного излучения граничные условия (правая граница конденсированной фазы) формулируются в следующем виде:

$$-\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} = \sigma T_e^4, \quad (4.9)$$

$$G(\Gamma_{kv}(t)) = (1 - R_{kv}(T_e))G_0 \exp(-(t/\tau)^2).$$

где σ – постоянная Стефана-Больцмана, R_{kv} – отражательная способность поверхности мишени, τ – полуширина лазерного импульса.

4) Фронт ударной волны: $x = \Gamma_{sh}(t)$. В задаче рассматривается возникновение и распространение ударной волны по конденсированной фазе. На подвижном фронте ударной волны $x = \Gamma_{sh}(t)$ выписываются три закона сохранения, так называемые соотношения Рэнкина – Гюгонио [196]:

$$\begin{aligned} x = \Gamma_{sh}(t): \quad j_{sh}^m &= \rho_1(u_1 - v_{sh}) = \rho_0(u_0 - v_{sh}), \\ j_{sh}^i &= P_1 + \rho_1(u_1 - v_{sh})^2 = P_0 + \rho_0(u_0 - v_{sh})^2, \\ j_{sh}^e &= W_1 + j_{sh}^m \left[\varepsilon_{i,1} + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{(u_1 - v_{sh})^2}{2} \right] = W_0 + j_{sh}^m \left[\varepsilon_{i,0} + \frac{P_0}{\rho_0} + \frac{(u_0 - v_{sh})^2}{2} \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

где j_{sh}^m , j_{sh}^i , j_{sh}^e – потоки массы, импульса и энергии. Величины с индексом 0 относятся к значениям со стороны фона УВ, а 1 – ударной волны.

4.6. Метод динамической адаптации. Постановка задачи в произвольной нестационарной системе координат.

Одной из основных вычислительных особенностей рассматриваемой модели является наличие подвижных разрывных решений типа ударных волн, межфазных фронтов, контактных и свободных границ. Аппроксимация исходной дифференциальной модели (4.1) – (4.10) осуществлялась семейством консервативных конечно-разностных схем, записанных на расчетных сетках с динамической адаптацией [197, 198].

Как уже отмечалось ранее, метод динамической адаптации основывается на идее применения произвольной нестационарной системы координат, переход к которой осуществляется посредством преобразования координат с помощью искомого решения. Это позволяет, проблему построения и адаптации расчетных сеток формулировать на дифференциальном уровне [199]. В итоге, в расширенной дифференциальной модели часть дифференциальных уравнений описывает физические процессы, а другая – поведение узлов сетки. При этом

контролируемое движение узлов сетки осуществляется искомым решением [200]. Динамическая адаптация позволяет производить расчеты с произвольным числом разрывных решений, типа ударных волн [200], распространяющихся фазовых [84, 201] и температурных фронтов [202], контактных и свободных границ, автоматизировать проблему создания новых областей [203], в том числе, в виде отколотых фрагментов [161, 172].

В рассматриваемой проблеме построение расчётной сетки с общим числом узлов равным 200, осуществлялось на отрезке равном исходной толщине (200 нм) мишени. Кроме того, каждый из отколотых фрагментов дополнительно содержал в среднем около 30 узлов.

4.7 Математическая модель

С помощью замены переменных общего вида и соотношений (2.11), (2.12) дифференциальная модель (4.1) в переменных (q, τ) представляется в виде:

$$\left(\begin{array}{l} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q} \\ \frac{\partial}{\partial \tau} [\psi \rho_i] + \frac{\partial}{\partial q} [\rho_i (u + Q)] = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \tau} [\psi \rho_i u] + \frac{\partial}{\partial q} [P + \rho_i u (u + Q)] = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \tau} [\psi \rho_e \varepsilon_e] + \frac{\partial}{\partial q} [\rho_e \varepsilon_e (u + Q)] = - \left(P_e \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{\partial W_e}{\partial q} + \psi g(T_e)(T_e - T_i) + \frac{\partial G}{\partial q} \right) \\ \frac{\partial [\psi \rho_i \varepsilon_i]}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial q} [\rho_i \varepsilon_i (u + Q)] = - \left(P_i \frac{\partial u}{\partial q} + \frac{\partial W_i}{\partial q} - \psi g(T_e)(T_e - T_i) \right) \\ \frac{\partial G}{\partial q} - \psi \alpha(T_e) G = 0 \end{array} \right)_{k=s, \ell, v} \quad (4.11)$$

$$\tau > 0, \quad [\Gamma_s < q < \Gamma_{sh,s}] \cup [\Gamma_{sh,s} < q < \Gamma_{s\ell}] \cup [\Gamma_{s\ell} < q < \Gamma_{\ell v}]$$

Уравнения состояния и тепловые потоки:

$$P(\rho, T) = P_e(\rho_e, T_e) + P_i(\rho_i, T_i),$$

$$\rho = \rho_e + \rho_i.$$

$$\varepsilon_e = \varepsilon_e(T_e, \rho_e), \quad \varepsilon_i = \varepsilon_i(T_i, \rho_i), \quad W_{i,e} = -\frac{\lambda_{i,e}}{\psi} \frac{\partial T_{i,e}}{\partial q},$$

Таким образом, переход из физического пространства $\Omega_{x,t}$ в расчетное пространство с произвольной нестационарной системой координат $\Omega_{q,\tau}$ сопровождается трансформацией исходной дифференциальной системы

уравнений (4.1) в расширенную систему (4.11), в которой добавляется дополнительное уравнение (2.14), являющееся уравнением обратного преобразования. Тип, свойства и вид краевых условий для этого уравнения зависят от конкретного вида функции преобразования Q . Соответственно для этого уравнения в начальные и граничные условия вносятся необходимые дополнения. Соответствующим образом видоизменяются начальные и граничные условия в остальных уравнениях.

В итоге, в физическом пространстве неизвестными являются не только функции физических полей, но и координаты узлов сетки. После определения функции Q уравнение обратного преобразования используется для построения в физическом пространстве адаптирующей к решению сетки. Его разностный аналог описывает динамику узлов сетки, а функция Q осуществляет управляемое перемещение узлов сетки, согласованное с динамикой искомого решения. В расчетном пространстве узлы сетки и все разрывные и межфазные границы неподвижны. Значения функции Q на границах области определяются из граничных условий.

Выбор функции Q

Функцию Q , согласованную с искомым решением можно определить из принципа квазистационарности [89,56,202], согласно которому находится такая нестационарная система координат, в которой все процессы протекают стационарно. Так как в уравнения баланса энергии входят все гидродинамические величины для определения функции Q , достаточно ограничиться двумя уравнениями энергии для ε_e и ε_i из системы (4.11), предположив, что $\partial\varepsilon_e/\partial\tau = \partial\varepsilon_i/\partial\tau = 0$. Тогда функция Q будет иметь вид

$$Q = -u - \frac{2P \frac{\partial u}{\partial q} + \left(\frac{\partial W_e}{\partial q} + \frac{\partial W_i}{\partial q} + \frac{\partial G}{\partial q} \right)}{\rho_e \frac{\partial \varepsilon_e}{\partial q} + \rho \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial q} + re} \quad (4.12)$$

где $re \approx 10^{-5}$ - константа, при разностной аппроксимации предотвращающая обращение знаменателя в ноль.

4.8. Краевые условия

В переменных q, τ краевые условия представляются следующим образом.

1). Начальные условия:

$$\tau = 0: \quad u(0, q) = 0, \quad p(0, q) = 0, \quad \rho(0, q) = \rho_0, \quad T_e(0, q) = T_a = T_0, \quad \psi(0, q) = 1$$

Граничные условия:

Левая неподвижная граница $q = \Gamma_s$:

$$\rho_s u_s = 0, \quad W_T = 0, \quad Q_s(\tau, \Gamma_s) = 0 \quad (4.13)$$

2). Фронт плавления $q = \Gamma_{s\ell}$:

$$j_{s\ell}^m = \rho_s(u_s + Q_{s\ell}) = \rho_\ell(u_\ell + Q_{s\ell}) \quad (4.14)$$

$$j_{s\ell}^i = P_s + \rho_s(u_s + Q_{s\ell})^2 = P_\ell + \rho_\ell(u_\ell + Q_{s\ell})^2, \quad (4.15)$$

$$j_{s\ell}^e = \left(\frac{\lambda_i}{\psi} \frac{\partial T_i}{\partial q} \right)_s - \left(\frac{\lambda_i}{\psi} \frac{\partial T_i}{\partial q} \right)_\ell = -L_m^{ne} \rho_s(Q_{s\ell} + u_s), \quad Q_{s\ell} = -v_{s\ell} \quad (4.16)$$

$$\left(\frac{\lambda_e}{\psi} \frac{\partial T_e}{\partial q} \right)_s = \left(\frac{\lambda_e}{\psi} \frac{\partial T_e}{\partial q} \right)_\ell, \quad T_{e,s} = T_{e,\ell}, \quad (4.17)$$

Зависимости $v_{s\ell}(\Delta T)$, $T_m(P_s)$, L_m^{ne} определены ранее, см. п. 4.5.

3). Фронт испарения $q = \Gamma_{kv}$:

$$j_{kv}^m = \rho_k(u_k + Q_{kv}) = \rho_v(u_v + Q_{kv}) \quad (4.18)$$

$$j_{kv}^i = P_k + \rho_k(u_k + Q_{kv})^2 = P_v + \rho_v(u_v + Q_{kv})^2 \quad (4.19)$$

$$j_{kv}^e = \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \right)_k = -L_v^{ne} \rho_k(Q_{kv} + v_k), \quad Q_{kv} = -v_{kv} \quad (4.20)$$

Дополнительные соотношения на испаряющейся поверхности выписаны ранее в (4.8).

Граничные условия для электронной компоненты и лазерного излучения представлены в следующем виде:

$q = \Gamma_{kv}$:

$$-\frac{\lambda_e \rho_e}{\psi} \frac{\partial T_e}{\partial q} = \sigma T_e^4, \quad (4.21)$$

$$G(\tau) = (1 - R_{kv}(T_e))G_0 \exp(-(\tau/\tau_{las})^2) \quad (4.22)$$

где σ – постоянная Стефана-Больцмана, R_{kv} – отражательная способность поверхности мишени, τ_{las} – полуширина лазерного импульса.

4). Фронт ударной волны: $q = \Gamma_{sh,s}$

$q = \Gamma_{sh,s}$: Соотношения Рэнкина – Гюгонио [196]:

$$j_{sh,s}^m = \rho_1(u_1 + Q_{sh,s}) = \rho_0(u_0 + Q_{sh,s}), \quad Q_{sh,s} = -v_{sh,s}, \quad (4.23)$$

$$j_{sh,s}^i = P_1 + \rho_1(u_1 + Q_{sh,s})^2 = P_0 + \rho_0(u_0 + Q_{sh,s})^2, \quad (4.24)$$

$$j_{sh,s}^e = W_1 + j_{sh,s}^m \left[\varepsilon_{i,1} + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{(u_1 + Q_{sh,s})^2}{2} \right] = W_0 + j_{sh,s}^m \left[\varepsilon_{i,0} + \frac{P_0}{\rho_0} + \frac{(u_0 + Q_{sh,s})^2}{2} \right] \quad (4.25)$$

где $j_{sh,s}^m$, $j_{sh,s}^i$, $j_{sh,s}^e$ – потоки массы, импульса и энергии. Величины с индексом 0 относятся к значениям со стороны фона УВ, а 1 – ударной волны.

4.9. Разностные схемы

Система дифференциальных уравнений (4.11) аппроксимировалась семейством консервативных разностных схем, полученных с помощью интегро-интерполяционного метода [98]. Для их построения в расчётном пространстве $\Omega_{q,\tau}$ в каждой из подобластей вводятся расчётные сетки $(\omega_i^j)_{k=s,\ell,sh}$ с постоянным шагом h по пространственной переменной q . По временной переменной τ вводится переменный шаг $\Delta\tau^j$. При разностной аппроксимации уравнений к узлам с целочисленными индексами относятся потоковые величины W_e , W_i , G и сеточные функции u , Q , x , а к точкам с полуцелыми индексами ($q_{i+1/2} = q_i + 0.5h$) – сеточные функции ε_e , ε_i , T_e , T_i , ρ , ψ .

$$(\omega_i^j)_k = \left\{ (q_i, \tau^j), (q_{i+1/2}, \tau^j); \quad q_{i+1} = q_i + h, \quad q_{i+1/2} = q_i + 0.5h, \right. \\ \left. \tau^{j+1} = \tau^j + \Delta\tau^j, \quad i = 0, \dots, N-1, \quad j = 0, 1, \dots \right\}_{k=s,\ell,v}$$

Семейство разностных схем имеет следующий вид:

$$\frac{1}{\Delta\tau^j} (\psi_{i-1/2}^{j+1} - \psi_{i-1/2}^j) = -\frac{1}{h} (Q_i^{\sigma_1} - Q_{i-1}^{\sigma_1}),$$

$$\frac{1}{\Delta\tau^j}(\Psi_{i-1/2}^{j+1}\rho_{i-1/2}^{j+1} - \Psi_{i-1/2}^j\rho_{i-1/2}^j) = -\frac{1}{h}(\rho_{*i}^{\sigma_2}(Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) - \rho_{*i-1}^{\sigma_2}(Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3})),$$

$$\frac{1}{2\Delta\tau^j}(u_i^{j+1}(\Psi_{i-1/2}^{j+1}\rho_{i-1/2}^{j+1} + \Psi_{i+1/2}^{j+1}\rho_{i+1/2}^{j+1}) - u_i^j(\Psi_{i-1/2}^j\rho_{i-1/2}^j + \Psi_{i+1/2}^j\rho_{i+1/2}^j)) =$$

$$= -\frac{1}{h}(P_{i+1/2}^{\sigma_4} - P_{i-1/2}^{\sigma_4}) - \frac{1}{2h}(\rho_{*i}^{\sigma_2}(Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3})u_{i+1}^{\sigma_3} + \rho_{*i+1}^{\sigma_2}(Q_{i+1}^{\sigma_1} + u_{i+1}^{\sigma_3})u_i^{\sigma_3}) +$$

$$+ \frac{1}{2h}(\rho_{*i}^{\sigma_2}(Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3})u_{i-1}^{\sigma_3} + \rho_{*i-1}^{\sigma_2}(Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3})u_i^{\sigma_3}),$$

(4.26)

$$\frac{1}{\Delta\tau^j}((\Psi_{i-1/2}^{j+1}\rho_{e,i-1/2}^{j+1}\varepsilon_{e,i-1/2}^{j+1}) - (\Psi_{i-1/2}^j\rho_{e,i-1/2}^j\varepsilon_{e,i-1/2}^j)) = -\frac{1}{h}(\rho_{*e,i}^{\sigma_2}\varepsilon_{*e,i}^{\sigma_5}(Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) -$$

$$\rho_{*e,i-1}^{\sigma_2}\varepsilon_{*e,i-1}^{\sigma_5}(Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3}) + P_{e,i-1/2}^{\sigma_4}(u_i^{\sigma_3} - u_{i-1}^{\sigma_3})) + \frac{2}{h^2}\left(\lambda_{e,i}^{\sigma_6}\frac{T_{e,i+1/2}^{\sigma_7} - T_{e,i-1/2}^{\sigma_7}}{\psi_{i+1/2}^{\sigma_8} + \psi_{i-1/2}^{\sigma_8}} -$$

$$\lambda_{e,i-1}^{\sigma_6}\frac{T_{e,i-1/2}^{\sigma_7} - T_{e,i-3/2}^{\sigma_7}}{\psi_{i-1/2}^{\sigma_8} + \psi_{i-3/2}^{\sigma_8}}\right) - \psi_{i-1/2}^{\sigma_8}[g(T_e)^{\sigma_9}(T_e - T_i)^{\sigma_{10}}]_{i-1/2} - \frac{1}{h}(G_i^{\sigma_{11}} - G_{i-1}^{\sigma_{11}}),$$

$$\frac{1}{\Delta\tau^j}((\Psi_{i-1/2}^{j+1}\rho_{i-1/2}^{j+1}\varepsilon_{i-1/2}^{j+1}) - (\Psi_{i-1/2}^j\rho_{i-1/2}^j\varepsilon_{i-1/2}^j)) = -\frac{1}{h}(\rho_{*i}^{\sigma_2}\varepsilon_{*i}^{\sigma_5}(Q_i^{\sigma_1} + u_i^{\sigma_3}) -$$

$$-\rho_{*i-1}^{\sigma_2}\varepsilon_{*i-1}^{\sigma_5}(Q_{i-1}^{\sigma_1} + u_{i-1}^{\sigma_3}) + P_{i-1/2}^{\sigma_4}(u_i^{\sigma_3} - u_{i-1}^{\sigma_3})) +$$

$$+ \frac{2}{h^2}\left(\lambda_i^{\sigma_{12}}\frac{T_{i+1/2}^{\sigma_{11}} - T_{i-1/2}^{\sigma_{11}}}{\psi_{i+1/2}^{\sigma_8} + \psi_{i-1/2}^{\sigma_8}} - \lambda_{i-1}^{\sigma_{12}}\frac{T_{i-1/2}^{\sigma_{11}} - T_{i-3/2}^{\sigma_{11}}}{\psi_{i-1/2}^{\sigma_8} + \psi_{i-3/2}^{\sigma_8}}\right) + \psi_{i-1/2}^{\sigma_8}(g(T_e)^{\sigma_9}(T_e - T_i)^{\sigma_{10}})_{i-1/2}.$$

Здесь $f_{*i} = \frac{f_{i-1/2}\Psi_{i+1/2} + f_{i+1/2}\Psi_{i-1/2}}{\Psi_{i+1/2} + \Psi_{i-1/2}}$, представляет процедуру получения функции в

целых узлах i путем интерполяции значений функции в полуцелых узлах $i+1/2$, а

$f^{\sigma_r} = \sigma_r f^{j+1} + (1 - \sigma_r)f^j$, а $\sigma_r = \sigma_1, \sigma_2, \dots$ весовые множители, определяющие

степень неявности разностных схем. В рассматриваемых схемах значения весовых

множителей равнялось $\sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_{11} = 0.5$, $\rho \approx \rho_i$ (здесь i - индекс ионна), под

T , P , λ без индекса подразумевается температура, давление и коэффициент

теплопроводности для ионов соответственно, а под T_e , P_e , λ_e - для электронов.

4.10. Алгоритм решения

Исходная система уравнений (4.11) описывает процессы в области, разделённой тремя подвижными фронтами на три подобласти: плавления – кристаллизации Γ_{sl} , испарения Γ_{kv} и ударной волны Γ_{sh} - $[\Gamma_s < q < \Gamma_{sh,s}] \cup [\Gamma_{sh,s} < q < \Gamma_{sl}] \cup [\Gamma_{sl} < q < \Gamma_{lv}]$. В расчётах все три фронта выделяются явным образом, и система сеточных уравнений (4.26) решается во всех подобластях. Их сшивка на каждом из фронтов осуществляется с помощью трёх законов сохранения (4.14) – (4.16), (4.18) – (4.20), (4.23) – (4.25) и дополнительных соотношений (4.5) и (4.8)

Математическая формулировка законов сохранения на любом подвижном фронте состоит из трёх нелинейных дифференциально-алгебраических уравнений. Часть переменных может быть определена из решения системы (4.26) в граничных точках, остальные определяются из условий на разрывах.

Численное решение системы нелинейных сеточных уравнений (4.26) осуществлялось с помощью разработанного вычислительного алгоритма, схематично представленного на *Рис.19*, с вложенными итерационными циклами, состоящих из одного внешнего и двух внутренних циклов. В каждом из внутренних циклов используется итерационная процедура Ньютона. В первом внутреннем итерационном цикле из решения уравнения энергии определяется температура, а газодинамическая скорость и плотность считаются постоянными. Во втором наоборот - температура считается постоянной, а из решения уравнений движения и непрерывности соответственно находятся скорость и плотность. Кроме того, в каждом из двух внутренних циклов используется до четырех дополнительных итерационных циклов. В них итерационно решаются системы нелинейных уравнений, полученных из аппроксимации граничных условий на межфазных границах плавления, испарения и ударных волнах. Кроме того, после каждого внутреннего цикла давление пересчитывается через уравнение состояния.

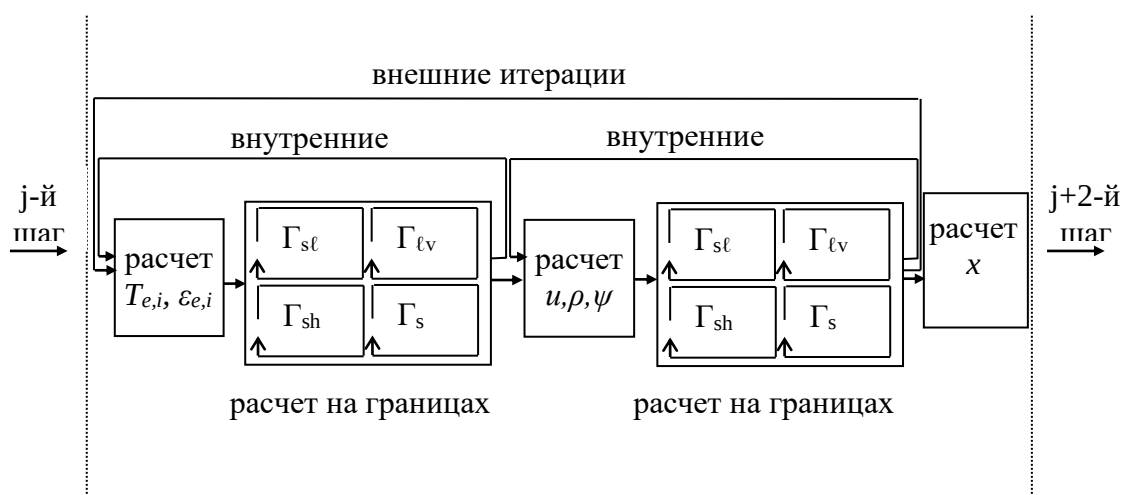


Рис.19. Схема вычислительного алгоритма.

4.11. Анализ результатов моделирования

Нагрев алюминиевой мишени толщиной 200нм инициируется лазерным импульсом гауссовой формы с длиной волны $\lambda_L=0.8\mu m$ с постоянной времени 100 фс, флюенсом 0.35 Дж/ см^2 и интенсивностью $G_0 = 1.97 \times 10^{12} \text{ Вт/см}^2$. Лазерное излучение распространяется справа налево и, попадая на поверхность металлической мишени, частично поглощается и частично отражается. Поглощенная энергия расходуется на нагрев облучаемой мишени, генерацию фазовых превращений и ударных волн в жидкой и твердой фазах, удаление материала в виде выброса вещества из облучаемой зоны мишени.

Гетеро - гомогенное плавление

Как уже отмечалось, в откольных механизмах и механизмах расслоения определяющую роль играют, тесно связанные между собой, механизмы гетерогенного и гомогенного плавления металлов, сопровождающиеся фундаментальными проблемами, перегретых / переохлаждённых метастабильных состояний.

Известно, что зарождение фронта гетерогенного плавления, как правило, происходит на свободных поверхностях, границах зёрен и на участках содержащих дефекты (вакансии, дислокации) и примеси, которые значительно снижают энергетические барьеры зарождения новой фазы. К фундаментальным аспектам гетерогенного механизма фазовых превращений, подлежащих исследованию и анализу, относятся неравновесная температура

плавления/кристаллизации T_{sl} и температурная зависимость скорости распространения гетерогенного фронта межфазной границы $v_{sl} = v(T_{sl})$. Математическая формулировка процесса возникновения и распространения фронта гетерогенного плавления, описывается системой уравнений (4.4), (4.5).

Гомогенные механизмы фазовых трансформаций характеризуются зарождением новой фазы в некотором объеме перегретого / переохлажденного вещества. Фундаментальной проблемой гомогенных механизмов плавления/затвердевания в теоретических и экспериментальных исследованиях является определение максимальной степени, до которой твердое тело может быть перегрето, а жидкость переохлаждена.

В натурных экспериментах достижение значительных перегревов в металлах затруднено доминированием гетерогенного зародышеобразования, особенно в случае низких скоростей нагрева. Решение этой проблемы состоит в подавлении гетерогенного зародышеобразования плавления с одновременным обеспечением высокой скорости объёмного нагрева. Выполнение этих условий способствует возникновению в исходной системе сильно перегретых метастабильных состояний необходимых для развития только гомогенного зародышеобразования внутри объема кристалла. Если при внешнем воздействии применяются не чрезвычайно высокие скорости нагрева, то гомогенное зародышеобразование плавления возникает при достижении максимального перегрева твёрдого тела. Степень максимального перегрева кристалла определяется до начала расчётов с помощью молекулярно-динамического моделирования [204] с последующим сравнением с результатами теоретических и экспериментальных исследований [205] – [208]. Обычно для алюминия, величина максимального перегрева твёрдой фазы находится в диапазоне $T_s^{max} = (1.2 \div 1.5)T_m$, и может увеличиваться при более высоких скоростях нагрева. В расчётах использовалось значение $T_s^{max} = 1.4T_m$.

Поглощенная доля энергии fs - лазерного импульса выделяется, в электронной подсистеме металла, вызывая её быстрый нагрев до высоких температур $T_e^{max} \approx 1.4 \cdot 10^4 K$ при практически холодной решетке. Медленный обмен

энергией между компонентами металла приводит к большому различию температур между ними, $T_e \gg T_i$, Рис.20.

Плавление начинается в момент времени $t \approx 70 \text{ fs}$ с формирования на облучаемой поверхности мишени гетерогенного фазового фронта $\Gamma_{sl}(t)$, распространяющегося со скоростью $v_{sl} = v(T_{sl})$ вглубь твёрдого тела. Значительный перегрев плавящейся поверхности и большие пространственные градиенты температуры, обеспечивают высокую скорость распространения фронта плавления $v_{sl} \sim 1\text{-}2 \text{ км/с}$. Мощный поток вещества через границу раздела $\Gamma_{sl}(t)$ и, продолжающийся объемный нагрев решетки за счет энергии электронов, приводят к формированию температурного максимума в твердой фазе, для которого выполняются неравенства: $T_s^{max}(P) \gg T_{sl} > T_m(P)$, Рис. 21. При достижении температуры предельного перегрева в твердотельной фазе металла в метастабильной области сильно перегретого приповерхностного слоя создаются предпосылки для возникновения гомогенного механизма плавления.

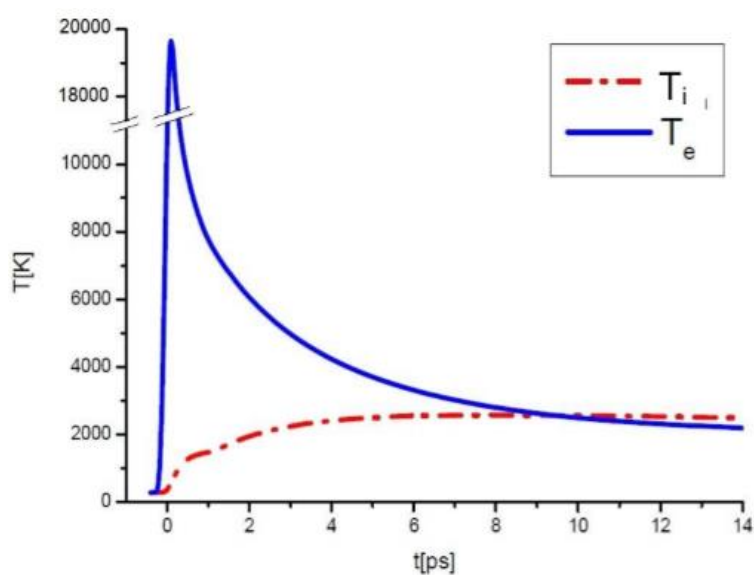


Рис.20. Временная зависимость температуры электронов и фононов на поверхности мишени.

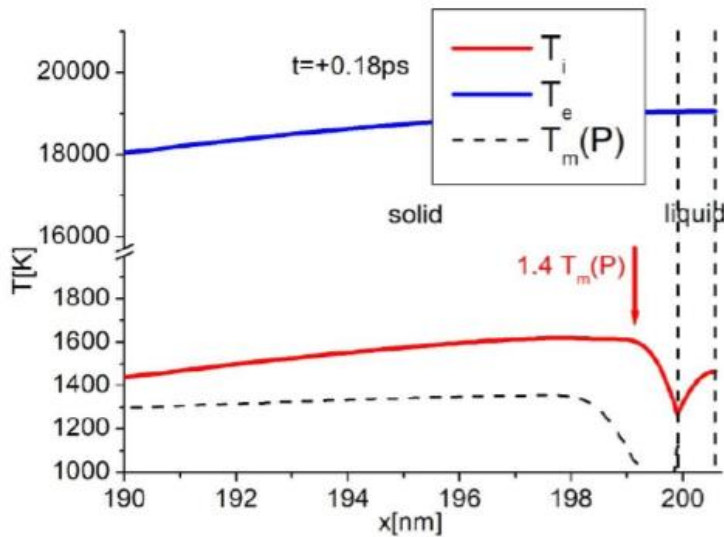


Рис. 21. Пространственные профили температуры и места внедрения первого квазизародыша.

В данной работе механизм гомогенного плавления моделируется введением квазизародышей жидкой фазы в точку максимального перегрева с температурой $T_s^{max} = 1.4T_m$. (положение этой точки на Рис. 21 указано вертикальной стрелкой) и размером $\Delta x \approx (0.1 - 1)$ nm. На границах квазизародыша выписываются кинетические условия гетерогенного плавления (4.4), (4.5), что обеспечивает появление двух новых фронтов плавления, распространяющихся в противоположных направлениях со скоростями $v_{sl,2}$ и $v_{sl,3}$. В итоге, получаем систему с тремя границами (фазовыми фронтами), движущимися со скоростями $v_{sl,1}$, $v_{sl,2}$ и $v_{sl,3}$, Рис. 22. Перемещение всех границ реализуется в рамках метода динамической адаптации.

При этом образовавшийся фрагмент твердого тела плавится с обеих сторон (скорости $v_{sl,1}$, $v_{sl,2}$). Второй фронт с $v_{sl,2}$ движется навстречу фронту плавления, идущему со стороны облученной поверхности с $v_{sl,1}$. Совместное воздействие двух фронтов способствует быстрому плавлению перегретого фрагмента. Третий фазовый фронт с $v_{sl,3}$, направленный от квазизародыша вглубь материала, создает новую перегретую область в оставшейся объемной мишени, в которой при достижении предельного перегрева появляется новый квазизародыш с двумя фронтами гетерогенного плавления.

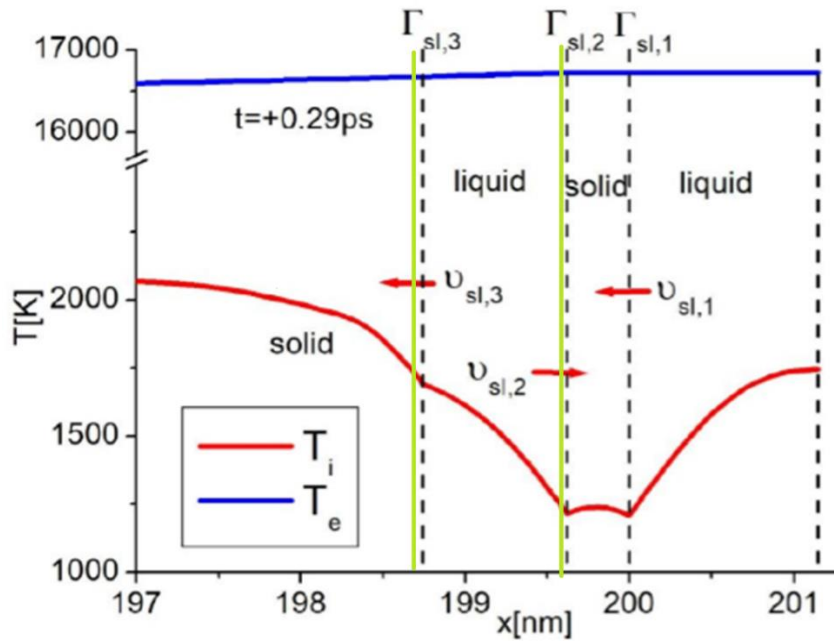


Рис. 22. Появление и развитие первого квазизародыша (представлено между двумя зелеными линиями). Движение гетерогенного фронта от поверхности.

Процесс генерации квазизародышей мультиплицируется до тех пор, пока в металле сохраняется состояние сильной термодинамической неравновесности, для которого выполняется соотношение $T_e \gg T_i$. При приближении системы к состоянию локального термодинамического равновесия, характеризующегося $T_e \geq T_i$, процесс гомогенного плавления переходит в стадию гетерогенного плавления, фазовый фронт которого движется за счёт энергии запасённой в жидкой фазе.

Общее число квазизародышей для рассматриваемого режима составляет около 20. Скорость гомогенного плавления определяется как производная по времени от суммарного пространственного размера множества жидких фаз. На Рис. 23 показана скорость плавления. Участки кривой, обозначенные красными пунктирными линиями, соответствуют скорости гетерогенного плавления, а синей сплошной линией – гомогенного плавления. Максимальное значение скорости составляет около 35 км/с, а среднее значение в течение первых 5 пикосекунд составляет около 20 км/с. После уравнивания температур $T_e \sim T_i$ плавление снова определяется медленным гетерогенным механизмом со скоростью ~ 200 -500 м/с. Скорость гомогенного плавления в несколько раз превышает скорость звука и значительно превышает скорость гетерогенного фронта плавления.

Полученные значения скорости однородного плавления качественно согласуются со значениями скорости однородного плавления пленки золота ($\approx 13.3 \text{ km/s}$), рассчитанной с использованием молекулярно-динамического подхода [209], которая также в несколько раз превышает скорость звука.

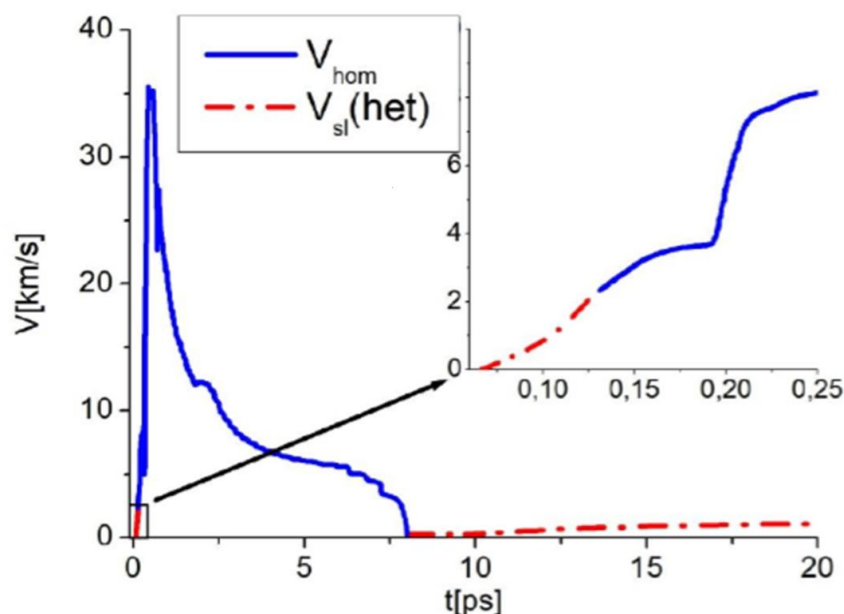


Рис. 23. Скорость гетерогенного (красный пунктир) и гомогенного (синяя сплошная линия) плавления.

Фрагментация. Динамическая фрагментация состоит из совокупности термодинамических и механических процессов, приводящих при выполнении определённых условий, к возникновению напряжённых состояний превышающих прочность вещества. Разгрузка этих состояний может приводить к механическим отколам, т.е. образованию пустот в веществе мишени. Учитывая сложную динамику формирования пустот в веществе, в расчётах важную роль играет выбор конкретного вида критерия откола.

Критерий откола. В данной работе критерий откола определялся с учётом высоких скоростей деформации $10^{10} - 10^{12} \text{ s}^{-1}$, характерных для лазерного фемтосекундного воздействия и осуществлялось с помощью молекулярно-динамического моделирования растяжения образца до его полного разрыва. Для твёрдой фазы в качестве критерия откола была получена линейная зависимость давления, проходящая через две точки

$$P(T = 273 \text{ K}) = -9.2 \text{ ГПа}, \quad P(T = 900 \text{ K}) = -3.92 \text{ ГПа} \quad (4.27)$$

В расплаве Al порог откола представляется в виде:

$$P = -\left(\sqrt{0.388\sigma^3 / kT}\right) / 10^9 \text{ ГПа}, \quad \text{где } \sigma = (1 - T/T_{cr})^{0.659} \quad (4.28)$$

Эволюция гидродинамических процессов тесно связана с плавлением. Высокая скорость фронта плавления и быстрое тепловое расширение приводят к образованию вблизи фронта плавления области сильного сжатия вещества.

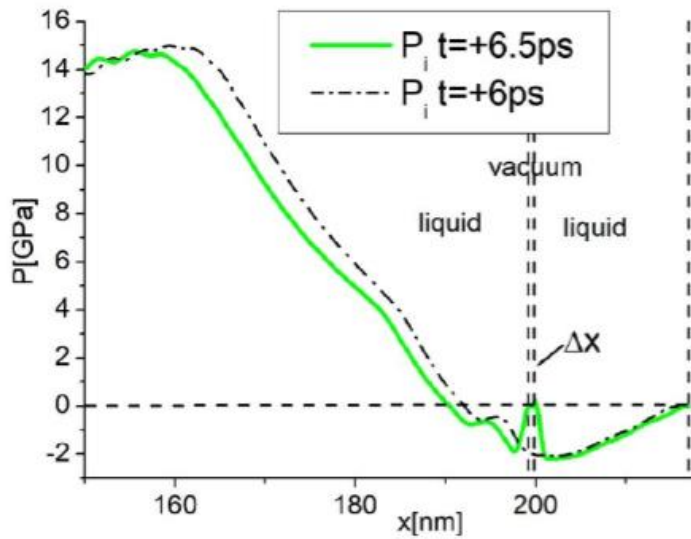


Рис. 24. Введение откола в момент времени $t = +6.5 \text{ ps}$ и $\Delta x \approx P \rightarrow 0$.

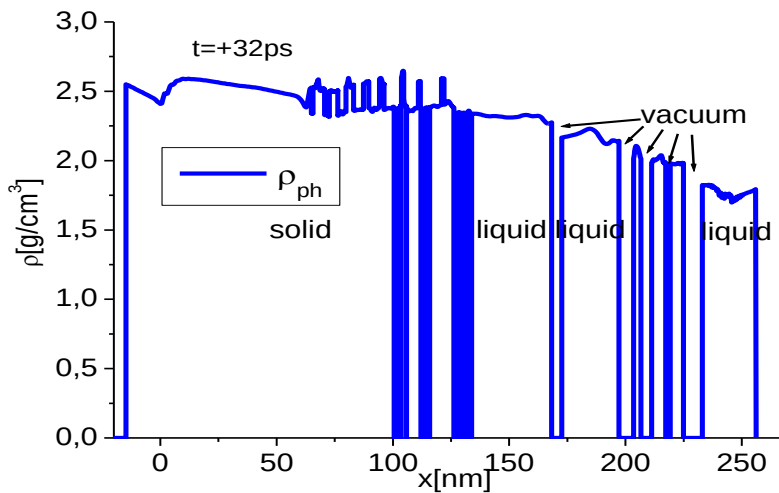


Рис. 25. Пространственное распределение плотности ρ в Al мишени и отколовшихся фрагментах при $t = +32 \text{ пс}$.

Распространение волны сжатия оказывает на вещество нагружающее воздействие, что соответствует положительной полуволне давления, *Рис. 24*. Вслед за уходящей волной сжатия, благодаря наличию свободной поверхности, формируется отрицательная полуволна давления (часто в литературе называемой волной разгрузки), *Рис. 24*. Если давление в волне разрежения достигает достаточно большого отрицательного значения необходимого для выполнения критерия механического откола (4.11), (4.12), то его выполнение приводит к резкому нарушению однородности в материале мишени, т.е. к отколу под действием отрицательного давления. В момент появления разрыва давление в отрицательной полуволне стремится к нулю. В пространственной точке, где $P \sim 0$ вводятся две новые подвижные границы с насыщенным паром между ними и граничными условиями (4.7), (4.8) описывающими кинетику поверхностного испарения и конденсации. В силу низкой интенсивности процесса испарения полагаем, что между отколами находится вакуум.

На *Рис. 25* представлены 15 фрагментов жидкой фазы размерами от 2 до 37 нм. В целом в данном режиме воздействия произошло около 30 механических отколов; но часть из них соединялись друг с другом, образуя более крупные фрагменты. Общее количество фрагментированного материала в пересчете на плотность исходного твердого вещества составляет 92 нм.

4.12. Валидация и верификация результатов моделирования

Качество полученных результатов моделирования определялось из сравнения с экспериментальными (валидация) [211] и теоретическими (верификация) [210] данными, полученные при тех же режимах лазерного воздействия на алюминиевые мишени.

В данной работе для расчётов использовалась алюминиевая мишень толщиной $\sim 1 \mu\text{m}$. На поверхность мишени фокусировался лазерный импульс с длиной волны $\lambda_L = 800 \text{ нм}$, гауссовым профилем по времени, полная ширина которого на полувысоте равнялась $\tau_L = 100 \text{ фс}$ и диапазоном значений флюенса - $F_L = 0,1\text{--}10 \text{ Дж/см}^2$.

Аналогичные режимы лазерного воздействия на мишени из Al использовались в экспериментальной работе [211] и теоретическом исследовании [210].

Сравнение результатов данной работы с экспериментальными [211] и теоретическими [210] результатами производились по количеству вынесенного вещества, пересчитанного затем на глубину кратера. Результаты сравнения, дополненные отклонениями в процентах (%), приведены в таблице 1 и Рис. 26.

N п/п	Флюенс F (Дж/см ²)	Количество вынесенного вещества r (нм)			Отклонение результатов dev (%)	
		Данная работа r1	Экспери мент [211]) r2	Результаты расчетов [210] r3	Данной работы и эксперимента [211]. dev= (r1-r2)/r1	Данной работы и расчетов [210] dev= (r1-r3)/r3
1	0.39	30.5	20	~49	34.43	~37.75
2	0.62	37	41	~74	10.81	~50
3	1.00	80	87	~105	8.75	~23.81

Таблица 1.

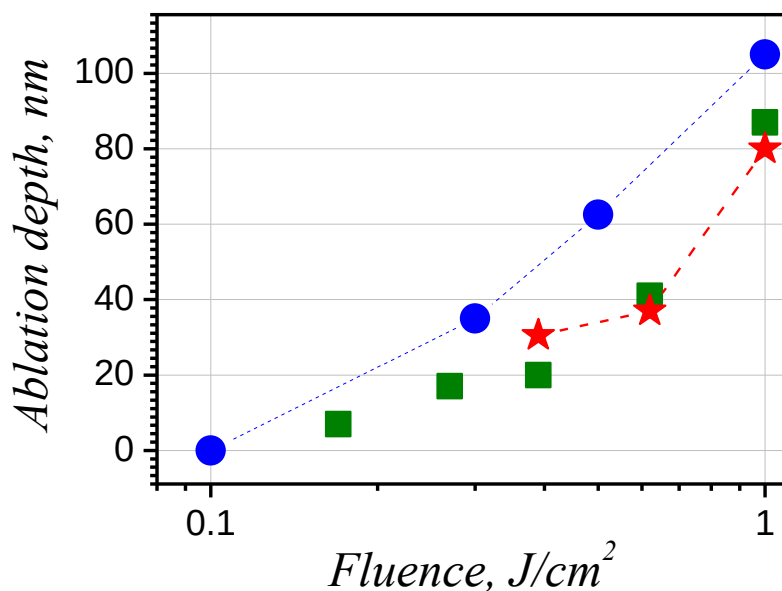


Рис. 26. Зависимость глубины абляции от флюенса. Сравнение экспериментальных [211] и расчётных [210] данных (отмечены зеленым и синим цветом соответственно) с результатами, полученными в данной работе (отмечены красным цветом).

Таким образом, выполненная валидация подтвердила, что результаты моделирования хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными [211]. Верификация также показала, что результаты моделирования находятся в разумном согласии с расчётами работы [210].

4.13. Заключение

Построена математическая модель плавления перегретого Al под воздействием fs- лазерного излучения. Кинетика плавления перегретого металла анализируется на основе неравновесной континуальной модели, которая явно связывает гомогенные и гетерогенные механизмы плавления. Разработан вычислительный алгоритм и создан программный комплекс на языке C++ для решения данной задачи.

Пределы перегрева твердых тел и механизмы плавления при очень высоких скоростях нагрева являются фундаментальными проблемами с многочисленными приложениями, одним из которых является динамическая фрагментация металлов в состоянии частичного или полного расплава с последующим выбросом материала.

Механизм гомогенного плавления моделируется введением квазизародышей жидкой фазы в области максимального перегрева твёрдой фазы.

Расчёты показали, что средняя скорость гомогенного плавления ~ 20 км/с в несколько раз превышает скорость звука и значительно превышает скорость гетерогенного фронта плавления $\sim (200 - 500)$ м/с.

Моделирование позволило определить толщину отколотых слоев, исследовать режимы, при которых происходит откол в расплаве и определить долю фрагментированного материала.

Заключение. Основные положения, выносимые на защиту:

Применение метода динамической адаптации позволяет существенно улучшить качество разностных схем и с одинаковым успехом использовать двухслойные и трёхслойные схемы при решении уравнения Бюргерса. При этом двухслойные схемы позволяют осуществлять интегрирование с меньшими вычислительными затратами.

Применение метода динамической адаптации к решению уравнения Кортевега – де Вриза позволило практически избавиться от дисперсии во всей области невязности двухслойных схем. Явные схемы при этом остаются абсолютно неустойчивы. В решении задачи о распространении солитона метод динамической адаптации позволяет производить интегрирование с увеличенным на 2 порядка шагом по времени.

Разработана однокоростная неравновесная двухтемпературная континуальная (гидродинамическая) модель ультракороткого лазерного воздействия на металлическую мишень. С помощью метода динамической адаптации выполнено математическое моделирование задач с произвольным числом подвижных границ и гидродинамических разрывов. Проведено исследование гомогенного и гетерогенного механизмов плавления, и фрагментации металлической мишени лазерным излучением. Получено хорошее совпадение с экспериментальными и теоретическими данными.

Разработаны вычислительные алгоритмы и созданы программные комплексы на языке C++ для решения уравнений Бюргерса и Кортевега – де Вриза и для прикладной задачи лазерной абляции металлов.

Список литературы.

1. Самарский А.А. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Вестник АН СССР, 1984, № 3, С. 77-88.
2. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Comparative analysis of the quality of two-and three-layer difference schemes of the second order // *Mathematica Montisnigri*. 2018. V. 43. P. 31-51.
3. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Two-layer finite-difference schemes for the Korteweg-de Vries equation in Euler variables // *Mathematica Montisnigri*. 2020. V. 49. P. 57-69. [Doi: 10.20948/mathmontis-2020-49-5](https://doi.org/10.20948/mathmontis-2020-49-5)
4. Быковская Е.Н., Шапранов А.В., Мажукин В.И. Анализ погрешности аппроксимации двухслойных разностных схем для уравнения Кортевега де-Вриза // Препринты ИПИМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 1. С. 17. [Doi: https://doi.org/10.20948/prepr-2021-1](https://doi.org/10.20948/prepr-2021-1)
5. Быковская Е.Н. Численное решение уравнения Кортевега-де Вриза на подвижной сетке с использованием двухслойных разностных схем // «Ученые записки физического факультета» Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова. 2022. № 1, 2210702.
6. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V., Bykovskaya E.N. Continual modeling of processes of homogeterogeneous melting and fragmentation of metal by ultrashort laser pulse // *Mathematica Montisnigri*. 2023. V. LVIII, P. 80-93. [Doi: 10.20948/mathmontis-2023-58-6](https://doi.org/10.20948/mathmontis-2023-58-6)
7. Thompson J.F., Thames F.S., Mastin C.W. Automatic Numerical Generation of Body-Fitten Curvilinear Coordinate System for Field Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies // *J. Comput. Phys*. 1974. V. 15. P. [Doi: 229-319. 10.1016/0021-9991\(74\)90114-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(74)90114-4)

8. Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Разностная схема на подвижных сетках для решения уравнений вязкого газа // ЖВМФ, 1979, Т. 19, № 1, С. 174 – 188. [Doi: https://doi.org/10.1016/0041-5553\(79\)90077-6](https://doi.org/10.1016/0041-5553(79)90077-6)
9. Dwyer H.A., Kee R.J., Sanders B.R. Adaptive Grid Method for Problems in Fluid Mechanics and Heat Transfer // AIAA J. 1980. V. 18, № 10, P. 1205 - 1212. [Doi: 10.2514/3.50872](https://doi.org/10.2514/3.50872)
10. Rai M.M., Anderson D.A. Application of Adaptive Grids to Fluid - Flow Problems with Asymptotic Solutions // AIAA J. 1982. V. 20, № 4, P. 486 - 502.
11. Гаранжа В.А. “Билипшицевы параметризации негладких поверхностей и построение поверхностных расчетных сеток” // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т. 45, № 8, С. 1383–1398; Comput. Math. Math. Phys. 2005. V. 45, № 8, P. 1334–1349.
12. Белокрыс-Федотов А.И., Гаранжа В.А., Кудрявцева Л.Н. “Построение сеток Делоне в неявных областях с обострением ребер” // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 56, № 11, С. 1931–1948; Comput. Math. Math. Phys. 2016. V. 56, № 11, P. 1901–1918. [Doi: https://doi.org/10.7868/S0044466916110041](https://doi.org/10.7868/S0044466916110041)
13. Garanzha V.A., Kudryavtseva L.N., Utyuzhnikov S.V. Variational method for untangling and optimization of spatial meshes // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2014. 269, P. 24–41. [Doi: 10.1016/j.cam.2014.03.006](https://doi.org/10.1016/j.cam.2014.03.006)
14. Забарко Д.А., Зубов В.И., Котенев В.П., Кривцов В.М., Полежаев Ю.А., “Численное моделирование течений газа около летательных аппаратов с учетом взаимодействия истекающей струи со спутным потоком” // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2015. Т. 55, № 4, С. 681–694; Comput. Math. Math. Phys. 2015. V. 55: № 4, P. 677–689. [Doi: 10.7868/S0044466915040201](https://doi.org/10.7868/S0044466915040201)

15. Koterov V.N., Krivtsov V.M., Zubov V.I. “Software package to calculate the aerodynamic characteristics of aircrafts”. 2017. Труды ИСП РАН, Т. 29, № 6, С. 271–288. [Doi: 10.15514/ISPRAS-2017-29\(6\)-17](https://doi.org/10.15514/ISPRAS-2017-29(6)-17)
16. Ушакова О.В. “Алгоритмы оптимизации трехмерных сеток для областей вращения” // Тр. ИММ УрО РАН. 2008. Т. 14, № 1, С. 150–180; Proc. Steklov Inst. Math. (Suppl.). 2008. V. 261, №. 1, P. 228 – 259. [Doi: https://doi.org/10.1134/S0081543808050192](https://doi.org/10.1134/S0081543808050192)
17. Азаренок Б.Н., “О построении структурированных сеток в двумерных невыпуклых областях с помощью отображений” // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т. 49, № 5, С. 826–839; Comput. Math. Math. Phys. 2009. V. 49, № 5, P. 797–809. [Doi: https://doi.org/10.1134/S0965542509050066](https://doi.org/10.1134/S0965542509050066)
18. Азаренок Б.Н., “Вариационный метод построения пространственных адаптивных сеток” // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48, №:5, С. 831–850; Comput. Math. Math. Phys. 2008. V. 48, № 5, P. 786–804. [Doi: https://doi.org/10.1134/S0965542508050084](https://doi.org/10.1134/S0965542508050084)
19. Chibisov D, Ganzha V, Mayr E, Vorozhtsov E. On the provable tight approximation of optimal meshing for non-convex regions. Computational topology and geometry in application of computer algebra (ACA2006), Varna, Bulgaria.
20. Huang W., Russell R.D. Adaptive Moving Mesh Methods. 2011. [Doi: 10.1007/978-1-4419-7916-2](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-7916-2)
21. Cao W., Huang W., Russell R.D. An r-adaptive finite element method based upon moving mesh PDEs // J. Comput. Phys. 1999. V. 149, № 2, P. 221-244. [Doi: 10.1006/JCPH.1998.6151](https://doi.org/10.1006/JCPH.1998.6151)
22. Arabi S., Camarero R., Guibault F., “Comparison of Mapping Operators For Unstructured Meshes” // Eng. Comput. 2015. V. 31, № 3, P. 579–595. [Doi: 10.1007/s00366-014-0361-2](https://doi.org/10.1007/s00366-014-0361-2)

23. Huang W., Kamenski L. A geometric discretization and a simple implementation for variational mesh generation and adaptation // Journal of Computational Physics. 2015. V. 301, № 2, P. 322-337. [Doi: 10.1016/j.jcp.2015.08.032](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.08.032)
24. Li R., Tang T. and Zhang P.. Moving Mesh Methods in Multiple Dimensions Based on Harmonic Maps // Journal of Computational Physics. 2001. 170, 562–588. [Doi: 10.1006/jcph.2001.6749](https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6749)
25. Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin C.W. Boundary-fitted coordinate systems for numerical solution of partial differential equations. A review //J. Comput. Phys. 1982. V. 47. № 1. P. 1-108. [Doi: 10.1016/0021-9991\(82\)90066-3](https://doi.org/10.1016/0021-9991(82)90066-3)
26. Brackbill J.U. and Saitzman J. Adaptive Zoning for Singular Problems in Two Dimensions // J. Comput, Phys.1982. V. 46, P. 342 - 368. [Doi: 10.1016/0021-9991\(82\)90020-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(82)90020-1)
27. Thompson J. F., Warsi Z. U. A., Mastin C. W. Numerical grid generation. Foundation and application. New York: Nort-Holland, 1985.
28. Дегтярев Л.М., Дроздов В.В.. Адаптирующиеся к решению сетки в эллиптических задачах на плоскости // Дифференциальные уравнения. 1984. Т. 20, № 7, С. 1194 - 1203.
29. Bell J.B., Shubin G.R. An Adaptive Grid Finite Difference Method for Conservation Laws // J. Comput. Phys. 1983. V. 52, № 3, P. 569 - 591. [Doi: https://doi.org/10.1016/0021-9991\(83\)90008-6](https://doi.org/10.1016/0021-9991(83)90008-6)
30. Kreis R.I., Thames F.C., Hassan H.A. Application of a Variational Method for Generating Adaptive Grids // AIAA J. 1986. № 3, P. 404 - 410.
31. Anderson D.A. Equidistribution Schemes, Poisson Generators, and Adaptive Grids // Appl. Mathem. Comput. 1987. V. 24, P. 211 - 227. [Doi: 10.1016/0096-3003\(87\)90085-3](https://doi.org/10.1016/0096-3003(87)90085-3)

32. Matsuno K., Dwyer H.A. Adaptive Methods for Elliptic Grid Generation // J. Comput. Phys. 1988. V. 77, P. 40 - 52.
33. Nakahashi K. and Deiwert G.S. Automatic Method for Adaptive Grids Generation and its Application to Problems of Profile Streamlining // AIAA J. 1987. V. 25, № 4, P. 513 -520.
34. Nakahashi K. and Deiwert G.S. Three - Dimensional Adaptive Grid Method //AIAA J. 1986. V. 24, № 6, P. 948 - 954. [Doi: 10.2514/3.9369](https://doi.org/10.2514/3.9369)
35. Miller K., Miller R. Moving Finite Elements. 1,11 // SIAM J. Num. Anal. 1981. V. 18, №6, P. 1019 - 1057. [Doi: 10.1137/0718070](https://doi.org/10.1137/0718070)
36. Verwtr J.G., Blom J.G., Sanz - Serna J.M. An Adaptive Moving Grid Method for One - Dimensional Systems of Partial Differential Equations // J. Comput. Phys. 1989. V. 82, P. 454 - 486.
37. Babuska I., Flaherty J.E., Henshaw W.D., Hopcroft J.E. Modeling, mesh generation, and adaptive numerical methods for partial differential. Berlin etc.: Springer, 1995. [Doi: 10.1007/978-1-4612-4248-2](https://doi.org/10.1007/978-1-4612-4248-2)
38. Прикладная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления // Тр. Всерос. конф. ВЦ РАН. М.: ВЦ РАН, 2004. Т. 1, 2.
39. Proceedings of the 4-9 International Conferences on numerical grid generation in computational field simulations. 1994-2005.
40. Вальгер С.А., Фёдорова Н.Н.. Применение алгоритма адаптации расчётной сетки к решению уравнений Эйлера // Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет. 2012. Т. 17, № 3.
41. Колдоба А.В., Устюгова Г.В., Боговалов С. В. Моделирование взаимодействия релятивистского и нерелятивистского течений на адаптивных сетках // Матем.

- моделирование, 2018, Т. 30, № 6, С. 3–20. Mathematical Models and Computer Simulations. 2019. V. 11, № 1, P. 86–96. [Doi: https://doi.org/10.1134/S2070048219010095](https://doi.org/10.1134/S2070048219010095)
42. Fuster D., Bague A., Boeck T., Moyne L.L., Leboissetier A., Popinet S., Ray P., Scardovelli R., Zaleski S. Simulation of primary atomization with an octreeadaptive mesh refinement and VOF method // International Journal of Multiphase Flow. 2009. V. 35, № 6, С. 550-56. [Doi: 10.1016/J.IJMULTIPHASEFLOW.2009.02.014](https://doi.org/10.1016/J.IJMULTIPHASEFLOW.2009.02.014)
43. Berger M.J. Data structures for adaptive grid generation // SIAM J. Sei. Statist. Comput. 1986. V. 7, № 3, P. 904-916. [Doi: https://doi.org/10.1137/0907061](https://doi.org/10.1137/0907061)
44. Hyman J.M., Li S. Iterative and dynamic control of adaptive mesh refinement with nested hierarchical grids. Report № 5462. Los Alamos Lab., 1998.
45. Andersen A., Zheng X., Cristini V. Adaptive unstructured volume remeshing - I: The method // J. Comput. Phys. 2005. V. 208. № 2. P. 616-625. [Doi: 10.1016/J.JCP.2005.02.023](https://doi.org/10.1016/J.JCP.2005.02.023)
46. Nourqaliev R.R., Dinh T.N., Theofanous T.G. Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics // J. Comput. Phys. 2006. V. 213. № 2. P. 500-529. [Doi: 10.1016/j.jcp.2005.08.028](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.08.028)
47. Lorin E., Bandrauk A.D. Multiresolution scheme for Time-Dependent Schrödinger Equation // Computer Physics Communications. 2010. V. 181, № 3, С. 626-638. [Doi: 10.1016/j.cpc.2009.11.012](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.11.012)
48. Benkhaldoun F., Elmahi I., Seaid M.. A new finite volume method for flux-gradient and source-term balancing in shallow water equations // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2010. V. 199, №. 49-52, P. 3324-3335. [Doi: 10.1016/j.cma.2010.07.003](https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.07.003)

49. Christlieb A., Qiu J-m, Shen C., Adaptive mesh refinement based on high order finite difference WENO scheme for multi-scale simulations // Journal of Computational Physics, 2011. V. 230, №10, P. 3780-3802. [Doi: 10.1016/j.jcp.2011.02.008](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2011.02.008)
50. Sheng Bi, Jianzhong Zhou, Yi Liu, Lixiang Song, A Finite Volume Method for Modeling Shallow Flows with Wet-Dry Fronts on Adaptive Cartesian Grids // Mathematical Problems in Engineering, V. 2014, Article ID 209562. [Doi: 10.1155/2014/209562](https://doi.org/10.1155/2014/209562)
51. J. Antoon van Hooft, Stéphane Popinet, Chiel C van Heerwaarden, Steven J.A. van der Linden¹, Stephan R. de Roode, Bas J. H. van de Wiel. Towards Adaptive Grids for Atmospheric Boundary-Layer Simulations // Boundary-Layer Meteorology. 2018. V. 167, P. 421–443. [Doi: 10.1007/s10546-018-0335-9](https://doi.org/10.1007/s10546-018-0335-9)
52. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Об одном подходе к построению адаптивных разностных сеток // Докл. АН СССР. 1988. Т. 298. № 1. С. 64-68.
53. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Об одном подходе к построению адаптивных сеток для нестационарных задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т. 28. № 3. С. 454-460. USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. 1988. V. 28, №, 3, P. 99–103. [Doi: https://doi.org/10.1016/0041-5553\(88\)90150-4](https://doi.org/10.1016/0041-5553(88)90150-4)
54. Дарьин Н.А., Мажукин В.И., Самарский А.А. Конечно-разностный метод решения одномерных уравнений газовой динамики на адаптивных сетках // Докл. АН СССР. 1988. Т. 302. № 5. С. 1078-1081.
55. Мажукин В.И., Такоева Л.Ю. Принципы построения динамически адаптирующихся к решению сеток в одномерных краевых задачах // Матем. моделирование. 1990. Т. 2. № 3. С. 101-118.

56. Мажукин В.И., Самарский А.А., Кастельянос О., Шапранов А.В. Метод динамической адаптации для нестационарных задач с большими градиентами // Матем. моделирование. 1993. Т. 5. № 4. С. 32-56.
57. Бреславский П.В., Мажукин В.И.. Метод динамической адаптации в задачах газовой динамики // Матем. моделирование. 1995. Т. 7. № 12. С. 48-78.
58. Hui W.H., Li P.Y., Li Z.W. A unified coordinate system for solving the two-dimensional Euler equations // J. Comput. Phys. 1999. V. 153, № 2, P. 596-637. [Doi: 10.1006/JCPH.1999.6295](https://doi.org/10.1006/JCPH.1999.6295)
59. Hui W.H., Kudriakov S. A unified coordinate system for solving the three-dimensional Euler equations // J. Comput. Phys. 2001. V. 172, № 1, P. 235-260. [Doi: 10.1006/jcph.2001.6822](https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6822)
60. Гильманов Н.А. Применение динамически адаптивных сеток к исследованию течений с многомасштабной структурой потока // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2001. Т. 41. № 2. С. 311-326.
61. Руденко Д.В., Утюжников С.В. Применение динамически адаптивных к решению сеток для моделирования пространственных нестационарных течений газа с большими градиентами // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2002. Т. 42. № 3. С. 395-409.
62. Tang H., Tang T. Adaptive mesh methods for one- and two-dimensional hyperbolic conservation laws // SIAM J. Numer. Analys. 2003. V. 41. № 2. P. 487-515. [Doi: 10.1137/S003614290138437X](https://doi.org/10.1137/S003614290138437X)
63. Бреславский П.В., Мажукин В.И. Динамически адаптирующиеся сетки для взаимодействующих разрывных решений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 45. № 4. С. 717-737. Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2007. V. 47, №. 4, P. 687–706. [Doi: https://doi.org/10.1134/S0965542507040124](https://doi.org/10.1134/S0965542507040124)

64. Афонди́ков А.Л., Луцкий А.Е., Меньшов И.С., Никитин В.С., Ханхасаева Я.В., Численное моделирование возвратного течения при разделении движущихся со сверхзвуковыми скоростями тел // Матем. Моделирование. 2019. Т. 31, №. 9, С. 21–38. [Doi: 10.1134/S0234087919090028](https://doi.org/10.1134/S0234087919090028)
65. Федоренко Р.П. Итерационные методы решения разностных эллиптических уравнений // Успехи математических наук. 1973. Т. XXVIII, вып. 2(170), С.129-195. [Doi: https://doi.org/10.1070/RM1973v028n02ABEH001542](https://doi.org/10.1070/RM1973v028n02ABEH001542)
66. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Параллельный многосеточный метод для разностных эллиптических уравнений // Матем. Моделирование. 2014. Т. 26. №. 1. С. 55–68. Mathematical Models and Computer Simulations. 2014. V. 6, №. 4, P. 425–434. [Doi: https://doi.org/10.1134/S2070048214040103](https://doi.org/10.1134/S2070048214040103)
67. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Многосеточный метод для анизотропных уравнений диффузии на основе адаптации чебышевских сглаживателей // Матем. Моделирование. 2014. Т. 26. №. 9. С.126-140. Mathematical Models and Computer Simulations. 2015. V. 7, № 2, P. 117–127. [Doi: https://doi.org/10.1134/S2070048215020118](https://doi.org/10.1134/S2070048215020118)
68. Жуков В.Т., Краснов, М.М., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Сравнение эффективности многосеточного метода на современных вычислительных архитектурах // Программирование. 2015. № 1. С. 21-31.
69. Жуков В.Т., Краснов, М.М., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Алгебраический многосеточный метод с адаптивными сглаживателями на основе многочленов Чебышева // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016, № 113. [Doi: https://doi.org/10.20948/prepr-2016-113](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-113)
70. Жуков В.Т., Феодоритова О.Б. Алгоритм расчета физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках, // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2020, № 124. [Doi: https://doi.org/10.20948/prepr-2020-124](https://doi.org/10.20948/prepr-2020-124)

71. Жилкин А.Г. Об одном способе динамической адаптации расчетных сеток к задачам магнитной гидродинамики // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47, № 11, С. 1898–1912. Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2007. V. 47, № 11, P. 1819–1832. Doi: <https://doi.org/10.1134/S0965542507110085>
72. Шокин Ю.И. Первое дифференциальное приближение. Новосибирск: Наука, 1979.
73. Мажукин А.В., Мажукин В.И. Динамическая адаптация в параболических уравнениях, Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47, № 11, С. 1913–1936. Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2007. V. 47, № 11, P. 1833–1855. Doi: <https://doi.org/10.1134/S0965542507110097>
74. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Математическое моделирование нестационарных двумерных краевых задач на сетках с динамической адаптацией // Математическое моделирование. 1989. Т.1, № 3, С. 29-43.
75. Mazhukin V.I., Demin M.M, Shapranov A.V., Smurov I. The method of construction dynamically adapting grids for problems of unstable laminar combustion // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals. 2003. V.44, № 4, P. 387 – 415. Doi: [10.1080/713836407](https://doi.org/10.1080/713836407)
76. Мажукин В.И., Мажукин А.В., Шапранов А.В. Динамическая адаптация в дифференциальных уравнениях в частных производных параболического типа. Энциклопедия низкотемпературной плазмы, Серия Б, Том УП – 1, Математическое моделирование в низкотемпературной плазме, Часть 1, с. 190 – 216, 2008, Москва, Янус-К.
77. Мажукин В.И., Самарский А.А., Чуйко М.М. Метод динамической адаптации для численного решения нестационарных многомерных задач Стефана // Доклады РАН. 1999. Т.368, №3, С.307 – 310.

78. Mazhukin V.I., Chuiko M.M. Solution of two-dimensional multi-interface Stefan problem by the method of dynamic adaptation // Mathematical Modeling and Analysis. 2001. V. 6, № 1, P. 129 – 137. [Doi: 10.1080/13926292.2001.9637152](https://doi.org/10.1080/13926292.2001.9637152)
79. Mazhukin V.I., Koroleva O.N., Chuiko M.M. Modeling of formation of deep 2D channels in metal targets via laser irradiation // SPIE “Laser Processing of Advanced Materials and Laser Microtechnologies”. 2002. V. 5121, P.87 – 97. [Doi: 10.1117/12.513847](https://doi.org/10.1117/12.513847)
80. Mazhukin V.I., Chuiko M.M. Solution of multi-interface Stefan problem by the method of dynamic adaptation // Computation Methods in Applied Mathematics. 2002. V.2, №3, P. 283-294. [Doi: 10.2478/cmam-2002-0017](https://doi.org/10.2478/cmam-2002-0017)
81. Mazhukin V.I., Chuiko M.M., Lapanik A.M. Dynamic adaptation method for numerical solution of axisymmetric Stefan problems // Mathematical Modeling and Analysis. 2003. V. 8, № 4, P. 303 -314. [Doi: 10.1080/13926292.2003.9637232](https://doi.org/10.1080/13926292.2003.9637232)
82. Mazhukin V.I., Chuiko M.M., Lapanik A.M. Dynamic adaptation method for modeling of melting and evaporation processes with convection // Mathematical Modeling and Analysis. 2005. V. 10, №, P. 473 – 478.
83. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Mazhukin A.V., Koroleva O.N. Mathematical formulation of a kinetic version of Stefan problem for heterogeneous melting/crystallization of metals // Mathematica Montisnigri, (MathScienceNet, Web of Science). 2016. V.36, P. 58-77.
84. Mazhukin V.I., Smurov I., Dupuy C., Jeandel D. Simulation of laser melting and evaporation of superconducting ceramics // J. Numerical Heat Transfer Part A. 1994. V. 26, №5, P. 587-600. [Doi: 10.1080/10407789408956011](https://doi.org/10.1080/10407789408956011)
85. Mazhukin V.I., Samarskii A.A. Mathematical Modeling in the Technology of Laser Treatments of Materials. Review // Surveys on Mathematics for Industry. 1994. V. 4, №2, P. 85-149.

86. Королёва О.Н., Мажукин В.И. Математическое моделирование лазерного плавления и испарения многослойных материалов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т. 46, № 5, С. 887–901. Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2006. V. 46, № 5, P. 848–862. Doi: <https://doi.org/10.1134/S0965542506050095>
87. Koroleva O.N., Mazhukin V.I. Mathematical Simulation of Laser Induced Melting and Evaporation of Multilayer Materials // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2006. V.46, № 5, P.848 – 862. Doi: [10.1134/S0965542506050095](https://doi.org/10.1134/S0965542506050095)
88. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V. High-speed laser ablation of metal with pico- and subpicosecond pulses // Applied Surface Science. 2014. V.302, P. 6–10. Doi: [10.1016/j.apsusc.2014.01.111](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.01.111)
89. Мажукин В.И., Самарский А.А., Шапранов А.В. Метод динамической адаптации в проблеме Бюргерса // Докл. Акад. Наука. 1993. Т. 333, №2, С. 165-169.
90. Мажукин В.И., Бреславский П.В., Шапранов А.В. Динамическая адаптация в дифференциальных уравнениях в частных производных гиперболического типа, Энциклопедия низкотемпературной плазмы // Математическое моделирование в низкотемпературной плазме, Часть 1, Москва, Янус-К, Серия Б. 2008. 7. Р. 217-247.
91. Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. М.: Наука, 1978. С. 688.
92. Truesdell C. A First Course in Rational Continuum Mechanics. The Johns Hopkins University, Baltimore, Maryland, 1972
93. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Гидродинамика. Изд. 4-е, М.: Наука. 1988. С. 736.

94. Петросян А.С. Дополнительные главы теории мелкой воды. Серия «Механика, управление и информатика», Москва, научно - образовательный Центр Институт космических исследований Российской Академии наук (ИКИ РАН), 2014. С. 64.
95. Годунов С.К. Рябенский В.С. Разностные схемы. М.: Наука, 1980.
96. Roache P.J., Computational Fluid Dynamics, Hermosa, Albuquerque, 1982.
97. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. Изд. 4-е, испр., Москва, Изд-во: УРСС, 2004.
98. Samarskii A.A. The theory of difference schemes. New York – Basel. Marcel Dekker, Inc. 2001. P. 761.
99. Anderson D., Tannehill J. C., Pletcher R. H. Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. CRC Press; 3 Edition. 2012. P. 774.
100. Годунов С.К. Разностная схема для численного вычисления разрывных решений уравнений гидродинамики // Мат. Сборник. 1959. Т. 47, С. 271-306.
101. Lax P.D., Wendroff B. Systems of conservation laws // Comm. Pure. Appl. Math. 1960. V. 13, P. 217-237. [Doi: 10.1002/CPA.3160130205](https://doi.org/10.1002/CPA.3160130205)
102. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second-order sequel to Godunov's method // J. Comput. Phys. 1997. V. 135, №2, P. 229–248. [Doi: 10.1006/jcph.1997.5704](https://doi.org/10.1006/jcph.1997.5704)
103. Harten A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws // J. Comput. Phys. 1983. V. 49, №3, P. 357–393. [Doi: 10.1016/0021-9991\(83\)90136-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(83)90136-5)
104. Boris J.P., Book D.L., Hair K. Flux-corrected transport II: Generalization of the method // J. Comput. Physics. 1975. V. 18, № 3, P. 248-283. [Doi: 10.1016/0021-9991\(75\)90002-9](https://doi.org/10.1016/0021-9991(75)90002-9)

105. Harten A. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1984. V. 21, № 1, P. 1-23. [Doi: https://doi.org/10.1137/0721001](https://doi.org/10.1137/0721001)
106. Вязников К.В., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П. Построение монотонных разностных схем повышенного порядка аппроксимации для систем уравнений гиперболического типа // Математическое моделирование. 1989. Т.1, №5, С. 95-120.
107. Harten A., Osher S. Uniformly high-order accurate non-oscillatory schemes I. // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1987. V. 24, № 2. [Doi: https://doi.org/10.1137/0724022](https://doi.org/10.1137/0724022)
108. Shu C. W., Osher S. Efficient Implementation of Essentially Non-Oscillatory Shock Capturing Schemes // Journal of Computational Physics. 1988. V. 77, № 2, P. 439-471. [10.1016/0021-9991\(88\)90177-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90177-5)
109. Osher S., Shu C. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II // J. Comput. Phys. 1989. Vol. 83, №1, P. 32-78. [Doi: 10.1016/0021-9991\(89\)90222-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(89)90222-2)
110. Liu X.D., Osher S., Chan T. Weighted essentially non-oscillatory schemes // J. Comp. Phys.. 1994. V. 115, №1, P. 200-212. [Doi: 10.1006/JCPH.1994.1187](https://doi.org/10.1006/JCPH.1994.1187)
111. Lele S.K. Compact finite-difference scheme with spectral-like resolution // J. Comput. Phys. 1992. V. 103, №1, P. 16-42. [Doi: 10.1016/0021-9991\(92\)90324-R](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-R)
112. Tarn C.K. W., Webb J.C. Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics, // J. Comput Phys. 1993. V. 107, № 2, P. 262-281. [Doi: 10.1006/JCPH.1993.1142](https://doi.org/10.1006/JCPH.1993.1142)

113. Головизнин В.М., Самарский А.А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Математическое моделирование. 1998. Т. 10, № 1, С. 86.
114. Iserles A. Generalized Leapfrog Methods // IMA J. Numer. Analys. 1986. V. 6, №4, P. 381-392. [Doi: 10.1093/imanum/6.4.381](https://doi.org/10.1093/imanum/6.4.381)
115. Головизнин В.М., Самарский А.А. Некоторые свойства разностной схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. Т. 10, № 1, С. 101–116.
116. Головизнин В.М., Карабасов С.А. Нелинейная коррекция схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. Т. 10, № 12, С. 107–123.
117. Головизнин В.М., Карабасов С.А., Кобринский И.М. Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными // Математическое моделирование. 2003. Т. 15, № 9, С. 29–48.
118. Карабасов С.А. Применение разностной схемы «кабаре» в задачах двухфазной фильтрации несмешивающихся жидкостей // Препринт ИБРАЭ № IBRAE- 1997- 15, Москва 1997.
119. Karabasov S.A., Goloviznin V.M. Compact accurately boundary adjusting high-resolution technique for fluid dynamics // J. Comput. Phys. 2009. V. 228, № 19, P. 7426-7451. [Doi: 10.1016/j.jcp.2009.06.037](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.06.037)
120. Головизнин В.М., Горбачев Д.Ю., Колокольников А.М., Майоров П.А., Майоров П.А., Тлепсук Б.А. Неявные обратимые по времени схемы “кабаре” для квазилинейных уравнений мелкой воды // Выч. мет. Программирование. 2016. Т. 17, №4, С. 402–414.
121. Lord Rayleigh. On waves. // Phil. Mag. 1876. 1, P. 257–279.

122. Boussinesq J. Theorie de l'intumescence Liquid, Appleteonde Solitaire au de Translation, se Propageant dans un Canal Rectangulaire, Les Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. 1871. V. 72, P. 755–759.
123. Korteweg D.J., G. de Vries. On the change of form of long waves advancing in rectangular canal and on a new type of long stationary waves // Philos. Mag. 1895. 36, P. 422-443. [Doi: 10.1080/14786435.2010.547337](https://doi.org/10.1080/14786435.2010.547337)
124. Dodd R.K., Eilbeck J.C., Gibbon J.D. and Morris H.C. Solitons and Nonlinear Wave Equations. London: Academic. 1982.
125. Whitham G.B. Linear and Nonlinear Waves, Wiley, New York, NY 1974. [Doi: 10.1115/1.3423786](https://doi.org/10.1115/1.3423786)
126. Zabusky N.J., Kruskal M.D. Interaction of “Solitons” in a collisionless plasma and the recurrence of initial states // Physical review letters. 1965. V. 15, № 6, P. 240-243. [Doi: 10.1103/PhysRevLett.15.240](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.15.240)
127. Rashid A. Numerical Solution of Korteweg-de Vries Equation by the Fourier Pseudospectral Method // Bull. Belg. Math. Soc. Simon Stevin. 2007. V. 14, P. 709–721. [Doi: 10.36045/bbms/1195157139](https://doi.org/10.36045/bbms/1195157139)
128. Greig I.S., Morris J.Ll. “A Hopscotch Method for the Korteweg-de-Vries Equation” // Journal of Comp. Phys. 1976. V.20, P.64-80. [Doi: 10.1016/0021-9991\(76\)90102-9](https://doi.org/10.1016/0021-9991(76)90102-9)
129. Djidjeli K., Price W.G., Twizell E.H., Wang Y. “Numerical methods for the solution of the third- and fifth-order dispersive Korteweg-de Vries equations.” // Journal of Comp. and Appl. Mathematics. 1995. V.58, P.307-336.
130. Kalisch H. and Raynaud X. On the rate of convergence of a collocation projection of the KdV equation // Mathematical Modelling and Numerical Analysis. 2007. V. 41, № 1, P. 95–110. [Doi: https://doi.org/10.1051/m2an:2007010](https://doi.org/10.1051/m2an:2007010)

131. Turabi G.. Collocation Method for Solving the Generalized KdV Equation // J.Appl. Math. Phys. 2020. V. 8, P. 1123-1134. [Doi: 10.4236/jamp.2020.86085](https://doi.org/10.4236/jamp.2020.86085)
132. Sajjadian M. “Numerical Solutions of Korteweg de Vries and Korteweg de Vries-Burger’s Equations Using Computer Programming.” // International Journal of Nonlinear Science. 2013. V.15, № 1, P. 69-79. [Doi: 10.48550/arXiv.1209.1782](https://doi.org/10.48550/arXiv.1209.1782)
133. Yi N., Huang Y., and Liu H., A direct discontinuous Galerkin method for the generalized Korteweg–de Vries equation: Energy conservation and boundary effect // J. Comput. Phys. 2013. V. 242, P. 351–366. [Doi: 10.1016/j.jcp.2013.01.031](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.01.031)
134. Bona J., Chen H., Karakashian O., and Xing Y. Conservative, discontinuous Galerkin methods for the generalized Korteweg–de Vries equation // Mathematics of Computation. 2013. V. 82, № 283, P. 1401–1432. [Doi: 10.1090/S0025-5718-2013-02661-0](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-2013-02661-0)
135. Zhang Q., Xia Y. Conservative and Dissipative Local Discontinuous Galerkin Methods for Korteweg-de Vries Type Equations // Commun. Comput. Phys. 2019. V. 25, № 2, P. 532-563. [Doi: 10.4208/cicp.OA-2017-0204](https://doi.org/10.4208/cicp.OA-2017-0204)
136. Ak T., Karakoc S.B.G. and Biswas A. Application of Petrov-Galerkin Finite Element Method to Shallow Water Waves Model: Modified Korteweg-de Vries Equation // Scientia Iranica B. 2017. V. 24, № 3, P. 1148-1159. [Doi: 10.24200/sci.2017.4096](https://doi.org/10.24200/sci.2017.4096)
137. Ak T., Karakoc S.B.G. and Biswas A. A New Approach for Numerical Solution of Modified Korteweg-de Vries Equation // Iranian Journal of Science and Technology, Transactions A: Science. 2017. V. 41, P. 1109-1121. [Doi: 10.1007/s40995-017-0238-5](https://doi.org/10.1007/s40995-017-0238-5)
138. Liu H. and Yi N. A Hamiltonian Preserving Discontinuous Galerkin Method for the Generalized Korteweg-de Vries Equation // Journal of Computational Physics. 2016. V. 321, P. 776-796. [Doi: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.06.010](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.06.010)

139. Karczewska A., Rozmej P., Szczeciński M., Boguniewicz Bartosz. A Finite Element Method for Extended KdV Equations // *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.* 2016. V. 26, № 3, P. 555–567. [Doi: 10.1515/amcs-2016-0039](https://doi.org/10.1515/amcs-2016-0039)
140. Karczewska A., Szczeciński M., Rozmej P., and Boguniewicz B. Finite element method for stochastic extended KdV equations // *Computational Methods in Science and Technology*. 2016. V. 22, № 1, P. 19–29.
141. Amein N.K., Ramadan M.A. A small time solutions for the KdV equation using Bubnov-Galerkin finite element method // *J. Egyptian Math. Society*. 2011. V. 19, № 3, P. 118–125. [Doi: 10.1016/j.joems.2011.10.005](https://doi.org/10.1016/j.joems.2011.10.005)
142. Irk D. Quintic B-Spline Galerkin Method for the KdV Equation // *Anadolu University Journal of Science and Technology B-Theoretical Sciences*. 2017. V. 5, № 2, P. 111–119. [Doi: 10.20290/aubtdb.289203](https://doi.org/10.20290/aubtdb.289203)
143. Ersoy O. and Dağ I. The Exponential Cubic B-Spline Algorithm for Korteweg-de Vries Equation // *Advances in Numerical Analysis*. 2015, V. 2015, № 1. Article ID: 367056. [Doi: https://doi.org/10.1155/2015/367056](https://doi.org/10.1155/2015/367056)
144. Vliegthart A.C. On finite-difference methods for the Korteweg-de Vries equation // *J Eng Math*. 1971. V. 5, P. 137–155. [Doi: 10.1007/BF01535405](https://doi.org/10.1007/BF01535405)
145. Goda K. On stability of some finite difference schemes for the korteweg-de vries equation // *Journal of the Physics Society of Japan*. 1975. V. 39, № 1, 229–236.
146. Самарский А. А., Мажукин В. И., Матус П. П., Михайлик И. А. L2-консервативные схемы для уравнения Кортевега-де Фриса // *Доклады академии наук*. 1997. V. 357, № 4, P. 458–461.
147. Mazhukin V.I., Matus P.P., Mikhailyuk I.A. Finite-difference schemes for the korteweg—de vries equation // *Differential Equations*. 2000. V. 36, № 5, P. 789–797. [Doi: 10.1007/BF02754240](https://doi.org/10.1007/BF02754240)

148. Головизин В.М., Карабасов С.А., Суходулов Д.А. Вариационный подход к получению разностной схемы с пространственно расщепленной временной производной для уравнения Kortвега-де Вриза // Матем. Моделирование. 2000. V. 12, № 4, P. 105 - 116.
149. Zhu S.H. A scheme with a higher-order discrete invariant for the KdV equation // Appl. Math. Lett. 2001. V. 14, № 1, P. 17-20.
150. Hui-Ping Wang, Yu-Shun Wang, and Ying-Ying Hu. An Explicit Scheme for the KdV Equation // Chinese Phys. Lett. 2008. V. 25, № 7, 2335 - 2338. [Doi: 10.1088/0256-307X/25/7/002](https://doi.org/10.1088/0256-307X/25/7/002)
151. Holden H., Koley U., Risebro N.H. Convergence of a fully discrete finite difference scheme for the Korteweg–de Vries equation // IMA Journal of Numerical Analysis. 2015. V. 35, № 3, P. 1047–1077. [Doi: 10.1093/imanum/dru040](https://doi.org/10.1093/imanum/dru040)
152. Kolebaje O., Oyewande E.O.. Numerical Solution of the Korteweg De Vries Equation by Finite Difference and Adomian Decomposition Method // International Journal of Basic and Applied Sciences. 2012. V. 1, № 3. [Doi: 10.14419/ijbas.v1i3.131](https://doi.org/10.14419/ijbas.v1i3.131)
153. Fortov V.E., Altshuler L.V., Trunin R.F. Funtikov A.I. High-Pressure Shock Compression of Solids VII: Shock Waves and Extreme States of Matter, 534, Springer, 2004.
154. Kanel, G.I. Spall fracture: methodological aspects, mechanisms and governing factors // Int. J. Fracture. 2010. V. 163, P. 173–191. [Doi: https://doi.org/10.1007/s10704-009-9438-0](https://doi.org/10.1007/s10704-009-9438-0)
155. Davison L., Grady D.E., Shahinpoor M. High Pressure Shock Compression of Solids II: Dynamic Fracture and Fragmentation. 499, Springer, 1996.

156. Cao Y., Shin Y.C. Shock Wave Propagation and Spallation Study in Laser Shock Peening // J. Eng. Mater. Technol. 2010. V. 132, № 4. Doi: [10.1115/MSEC2009-84048](https://doi.org/10.1115/MSEC2009-84048).
157. Ткаченко С.И., Хищенко К.В, Воробьев В.С., Левашов П.Р., Ломоносов И.В., Фортов В.Е. Метастабильные состояния жидкого металла в условиях электрического взрыва // Теплофизика высоких температур. 2001. Т. 39, № 5, Р. 728-742. High Temperature. 2001. V. 39, № 5, P. 674–687. Doi: <https://doi.org/10.1023/A:1012324925983>
158. Kanel G. I., Razorenov S. V., Fortov V. E. Shock-wave compression and tension of solids at elevated temperatures: superheated crystal states, pre-melting, and anomalous growth of the yield strength // J. Phys: Condensed Matter. 2004. V. 16, № 14, P. 1007–1016. Doi: [10.1088/0953-8984/16/14/010](https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/14/010).
159. Mayer P.N, Pogorelko V.V, Voronin D.S., Mayer AE. Spall Fracture of Solid and Molten Copper: Molecular Dynamics, Mechanical Model and Strain Rate Dependence // Metals. 2022. V. 12, № 11, P. 1878. Doi: [10.3390/met12111878](https://doi.org/10.3390/met12111878)
160. Ashitkov S.I., Agranat M., Kanel G.I., Fortov V.E. Approaching the ultimate shear and tensile strength of aluminum in experiments with femtosecond pulse laser // AIP Conf. Proc. 2012. V. 1426, P. 1081 - 1084. Doi: <https://doi.org/10.1063/1.3686466>
161. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V.. High-speed laser ablation of metal with pico- and subpicosecond pulses // Applied Surface Science. 2014. V. 302, P. 6–10. Doi: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.01.111>
162. Xiang, M., Jiang, S., Cui, J., Xu, Y., & Chen, J. Coupling of dynamic ductile damage and melting in shock-induced micro-spalling: Modeling and applications // International Journal of Plasticity. 2021. V. 136, № 5, Doi: [102849](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102849). [10.1016/j.ijplas.2020.102849](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102849)

163. Cahn R.W. Materials science: Melting and the surface // *Nature*. 1986. V. 323, P. 668–669. [Doi:10.1038/323668a0](https://doi.org/10.1038/323668a0)
164. Maddox J. Melting is merely skin-thick // *Nature*. 1987. V. 330, P. 599. [Doi: https://doi.org/10.1038/330599a0](https://doi.org/10.1038/330599a0)
165. Fu J., Zhang Ch., Liu T., Liu J. Room temperature liquid metal: its melting point, dominating mechanism and applications. Review article // *Front. Energy*. 2020. V. 14, № 1, P. 81–104. [Doi: https://doi.org/10.1007/s11708-019-0653-8](https://doi.org/10.1007/s11708-019-0653-8)
166. Nelson D.R., Halperin B. Dislocation-mediated melting in two dimensions // *Phys. Rev. B*. 1979. V. 19, № 5, 2457. [Doi: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.19.2457](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.19.2457)
167. Delogu F. Molecular dynamics simulations of homogeneous and heterogeneous melting scenarios in metals: Volume scaling and concentration of defects // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73, № 18, 184108. [Doi: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.184108](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.184108)
168. Christian J.W. *The Theory of Transformations in Metals and Alloys*. 1st Edition // Pergamon 2002. V. 6, № 3. [Doi: 10.1016/S1369-7021\(03\)00335-3](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(03)00335-3)
169. Mazhukin A.V., Mazhukin V.I., Demin M.M. Modeling of femtosecond laser ablation of Al film by laser pulses // *Applied Surface Science*. 2011. № 257, P. 5443–5446. [Doi: 10.1016/j.apsusc.2010.11.154](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2010.11.154)
170. Zhigilei L.V., Lin Z., Ivanov D.S. Atomistic Modeling of Short Pulse Laser Ablation of Metals: Connections between Melting, Spallation, and Phase Explosion // *J. Phys. Chem. C*. 2009. V. 113, № 27, 11892–11906. [Doi: 10.1021/jp902294m](https://doi.org/10.1021/jp902294m)
171. Mayer P.N., Mayer A.E. Late stages of high rate tension of aluminum melt: Molecular dynamic simulation // *Journal of Applied Physics*. 2016. V. 120, № 7, [Doi: 10.1063/1.4959819](https://doi.org/10.1063/1.4959819)

172. Mazhukin, V.I.; Demin, M. M.; Shapranov, A.V.; Mazhukin, A.V. Role of electron pressure in the problem of femtosecond laser action on metals // Applied Surface Sciece. 2020. V. 530, 147227. [Doi: 10.1016/j.apsusc.2020.147227](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147227)
173. Bogey C, Bailly C. A family of low dispersive and low dissipative explicit schemes for flow and noise computations // J. Comput. Phys. 2004. V. 194, P. 194-214. [Doi: 10.1016/j.jcp.2003.09.003](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.09.003)
174. Kriksin Yu.A., Kuchugov P.A., Ladonkina M.E., Nekliudova O.A., Tishkin V.F, Varin V.P. Construction of exact solutions of some equations of hyperbolic type containing discontinuity moving on a non uniform background // Mathematica Montisnigri. 2018. V. 42.
175. Colonius T., Lele S.K. Computational aeroacoustics: progress on nonlinear problems of sound generation // Progress in Aerospace Sei. 2004. V. 40, № 6, P. 345-416. [Doi: 10.1016/j.paerosci.2004.09.001](https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2004.09.001)
176. Головизнин В.М., Карабасов С.А., Козубская Т.К., Максимов Н.В. Схема “Кабаре” для численного решения задач аэроакустики: обобщение на линеаризованные уравнения Эйлера в одномерном случае // Ж. выч. мат. матем. физ. 2009. Т. 49, № 12, С. 2265–2280. Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2009. V. 49, № 12, P. 2168–2182. [Doi: https://doi.org/10.1134/S096554250912015X](https://doi.org/10.1134/S096554250912015X)
177. Hopf E.. The Partial Differential Equation $u_t + uu_x = \mu_{xx}$ // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1950. V. 3, № 3, P. 201-230. [Doi: 10.1002/cpa.3160030302](https://doi.org/10.1002/cpa.3160030302)
178. Cole J.D. On a quasi-linear parabolic equation occurring in aerodynamics // Quarterly of applied mathematics. 1951. V. 9, № 3, P. 225-236. [Doi: 10.1090/QAM/42889](https://doi.org/10.1090/QAM/42889)

179. Benton E.R., Platzman G.W. A Table of Solutions of the One-Dimensional Burgers Equation // Quarterly of Applied Mathematics. 1972. P.195-212. [Doi: 10.1090/QAM/306736](https://doi.org/10.1090/QAM/306736)
180. Wenyuan Liao and Jianping Zhu. Efficient and accurate finite difference schemes for solving one-dimensional Burgers' equation // International Journal of Computer Mathematics. 2011. V. 88, № 12. P. 2575-2590. [Doi: 10.1080/00207160.2010.548519](https://doi.org/10.1080/00207160.2010.548519)
181. Самарский А.А. Введение в численные методы, Издательство Наука, 1982.
182. Warming R.E., Hyett B.J. "The Modified Equation Approach to the Stability and Accuracy Analysis of Finite difference Methods" // J. Comput. Phys. 1974. V. 14, P. 159 -179.
183. Рабинович М.И., Трубецков Д.И. "Введение в теорию колебаний и волн." // НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика". 2000. С. 560.
184. Черняев А.П., Черняева С.А. Вырождение кноидальных волн в неограниченные решения для уравнения Кортевега де – Вриза // Журнал Радиоэлектроники, ISSN. 2018. № 6, 1684-1719. [Doi: 10.30898/1684-1719.2018.6.5](https://doi.org/10.30898/1684-1719.2018.6.5)
185. Рыскин Н.М., Трубецков Д.И. Нелинейные волны. 2013.
186. Yong Duan, Zhang Peng, Zeng Yan, Ahmed Naji. Convergence estimate of Cauchy problems for the shallow water equations with MQ quasi-interpolation, Preprint, Sep 2019.
187. Mazhukin V.I., Samarskii A.A. Mathematical Modeling in the Technology of Laser Treatments of Materials. Review // Surveys on Mathematics for Industry. 1994. V. 4, № 2, P. 85-149.

188. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Kinetic Melting and Crystallization Stages of Strongly Superheated and Supercooled Metals // Math. Models Comput. Simul. 2017. V. 9, № 4, P. 448-456. [Doi: 10.1134/S2070048217040081](https://doi.org/10.1134/S2070048217040081)
189. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Koroleva O.N. Atomistic modeling of crystal-melt interface mobility of fcc (Al, Cu) and bcc (Fe) metals in strong superheating/undercooling states // Math. Montis. 2020. V.48, P. 70-85. [Doi: 10.20948/mathmontis-2020-48-7](https://doi.org/10.20948/mathmontis-2020-48-7)
190. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Modification of the Wilson–Frankel kinetic model and atomistic simulation of the rate of melting/crystallization of metals // Matematicheskoe modelirovanie. 2023. V. 35, № 11, P. 103–121. [Doi: https://doi.org/10.20948/mm-2023-11-08](https://doi.org/10.20948/mm-2023-11-08)
191. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Mazhukin A.V., Koroleva O.N. Mathematical formulation of a kinetic version of Stefan problem for heterogeneous melting/crystallization of metals // Mathematica Montisnigri. 2016. V. XXXVI, P. 58 - 77.
192. Mazhukin V.I. Kinetics and Dynamics of Phase Transformations in Metals Under Action of Ultra-Short High-Power Laser Pulses // Laser Pulses – Theory, Technology, and Applications, InTech, Croatia, 2012. 10.5772/50731
193. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Mazhukin A.V., Koroleva O.N. Mathematical formulation of a kinetic version of Stefan problem for heterogeneous melting/crystallization of metals // Math. Montis. 2016. V. 36, P. 58-77.
194. Mazhukin V.I., Samokhin A.A. Boundary conditions for gas-dynamical modeling of evaporation processes // Math. Montis. 2012. V.24, P. 8-17.
195. Crout D. An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases // J. Math. Phys. 1936. № 15, P. 1–54.

196. Landau L.D., Lifshitz E.M. Fluid Mechanics. V. 6 (2nd ed.). Butterworth-Heinemann, 1987.
197. Бреславский П.В., Мажукин В.И. Алгоритм численного решения гидродинамического варианта задачи Стефана при помощи динамически адаптирующихся сеток. Математическое моделирование. 1991. V. 3, № 10, P. 104-115.
198. Mazhukin A.V., Mazhukin V.I. Dynamic Adaptation for Parabolic Equations // Comput. Mathem. Mathem. Phys. 2007. V. 47, № 11, P. 1833 – 1855. [Doi: 10.1134/S0965542507110097](https://doi.org/10.1134/S0965542507110097)
199. Mazhukin V.I., Demin M.M., Shapranov A.V., Smurov I. The method of construction dynamically adapting grids for problems of unstable laminar combustion // Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals. 2003. V. 44, № 4, P. 387 - 415. [Doi: 10.1080/713836407](https://doi.org/10.1080/713836407)
200. Breslavsky P.V., Mazhukin V.I. Dynamically Adapted Grids for Interacting Discontinuous Solutions // Comp. Math. and Math. Phys. 2007. V. 47, № 4, P. 687-706. [Doi: 10.1134/S0965542507040124](https://doi.org/10.1134/S0965542507040124)
201. Mazhukin V.I., Chuiko M.M. Solution of multi-interface Stefan problem by the method of dynamic adaptation // Computation Methods in Applied Mathematics. 2002. V.2, №3, P. 283-294. [Doi: https://doi.org/10.2478/cmam-2002-0017](https://doi.org/10.2478/cmam-2002-0017)
202. Breslavskii P.V., Mazhukin V.I. Dynamic Adaptation Method in Gasdynamic Simulations with Nonlinear Heat Conduction // Comp. Math. Math. Phys. 2008. V. 48, № 11, P. 2102–2115. [Doi: 10.1134/S0965542508110158](https://doi.org/10.1134/S0965542508110158)
203. Mazhukin V.I., Chuiko M.M., Lapanik A.M. Dynamic adaptation method for numerical solution of axisymmetric Stefan problems // Mathematical Modeling and Analysis. 2003. V. 8, № 4, P. 303 -314. [Doi: 10.3846/13926292.2003.9637232](https://doi.org/10.3846/13926292.2003.9637232)

204. Luo S.N., Ahrens T.J., Çağın T., Strachan A., Goddard W. A., Swift D. C. Maximum superheating and undercooling: Systematics, molecular dynamics simulations, and dynamic experiments // *Physical Review B*. 2003. V. 68, № 13. [Doi: 10.1103/PHYSREVB.68.134206](https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.68.134206)
205. Tallon J.L. A hierarchy of catastrophes as a succession of stability limits for the crystalline state // *Nature*. 1989. V. 342, P. 658–660. [Doi: https://doi.org/10.1038/342658a0](https://doi.org/10.1038/342658a0)
206. Lu K., Li Y. Homogeneous [Nucleation](#) Catastrophe as a Kinetic Stability Limit for Superheated Crystal // *Physical Review Letters*. 1998. V. 80, № 20. P. 4474–4477. [Doi: 10.1103/physrevlett.80.4474](https://doi.org/10.1103/physrevlett.80.4474)
207. Rethfeld B., Sokolowski-Tinten K., von der Linde D., Anisimov S. I. Ultrafast thermal melting of laser-excited solids by homogeneous nucleation // *Physical Review B*. 2002. V. 65, № 9. [Doi: 10.1103/PhysRevB.65.092103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.092103)
208. Mei Q.S., Lu K. Melting and superheating of crystalline solids: From bulk to nanocrystals // *Progress in Materials Science*. 2007. V. 52, № 8, P. 1175–1262. [Doi: 10.1016/j.pmatsci.2007.01.001](https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2007.01.001)
209. Gan Y., Chen J.K. Nonequilibrium phase change in gold films induced by ultrafast laser heating // *Optics Letters*. 2012. V. 37, № 13, 2691 - 2693. [Doi: 10.1364/OL.37.002691](https://doi.org/10.1364/OL.37.002691)
210. Povarnitsyn M.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R. Phase transitions in femtosecond laser ablation // *Applied Surface Science*. 2009. V. 255, № 10, P. 5120–5124. [Doi: 10.1016/j.apsusc.2008.07.199](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2008.07.199)
211. Nedialkov N.N., Atanasov P.A., Amoroso S., Bruzzese R., Wang X. Laser ablation of metals by femtosecond pulses: Theoretical and experimental study // *Applied Surface Science*. 2007. V. 253, № 19, P. 7761–7766. [Doi: 10.1016/j.apsusc.2007.02.083](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2007.02.083)

212. Lomonosov I.V., “Multi-phase equation of state for aluminum” // Las. Part. Beams. 2007. 25(04), P. 567-584. [Doi: 10.1017/s0263034607000687](https://doi.org/10.1017/s0263034607000687)