УДК 519.635

СХЕМА РАСЧЕТА НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕЧЕНИЙ ТЕПЛОПРОВОДНОГО ГАЗА В ТРЕХТЕМПЕРАТУРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

© 2024 г. В.Т. Жуков^{1,*}, О.Б. Феодоритова^{1,**}

¹ 125047 Москва, Миусская пл., 4, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН *e-mail: vic.zhukov@mail.ru **e-mail: feodor@kiam.ru

Поступила в редакцию 10.03.2024 г. Переработанный вариант 10.03.2024 г. Принята к публикации 05.05.2024 г.

Представлена методика численного моделирования нестационарных течений теплопроводного газа в трехтемпературном приближении. Методика построена с использованием основополагающих принципов С.К. Годунова. Для интегрирования по времени расчет каждого временного шага проводится с помощью расщепления определяющих уравнений на гиперболическую и параболическую подсистемы. Первая подсистема решается с помощью обобщения схемы Годунова, вторая — с помощью явно-итерационной чебышёвской схемы. Для дискретизации используются подвижные криволинейные адаптивные сетки, дискретная схема записывается в криволинейных координатах с сохранением симметрий дифференциальной задачи. Методика реализована в виде параллельного кода для многопроцессорных компьютеров. Основное назначение — обеспечение расчетных исследований по проблеме управляемого термоядерного синтеза, но возможно использование и в других приложениях вычислительной аэро-газодинамики. Библ. 28.

Ключевые слова: численное моделирование, высокотемпературная газовая динамика, многотемпературные модели, разностные схемы, схема Годунова, чебышёвские итерации.

DOI: 10.31857/S0044466924080153, EDN: XZXXLP

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной статье изложены основные элементы методики численного моделирования нестационарных течений теплопроводного газа с детализацией алгоритмической реализации трехтемпературного приближения [1—6]. Методика построена с использованием основополагающих принципов С.К. Годунова и ведет свое происхождение от знаменитой схемы решения уравнений газодинамики, изобретенной им в 1954 г. и опубликованной спустя пять лет [7]. В этот период под руководством С.К. Годунова начата разработка двумерной газодинамической программы, первый вариант которой заработал в 1958 г. Участниками разработки являлись в основном сотрудники отдела вычислительной газовой динамики Института прикладной математики. Этим отделом руководил С.К. Годунов до переезда в 1969 г. в Новосибирск, а затем отдел возглавил А.В. Забродин, под началом которого методика развивалась вплоть до 2008 г.

Базовая многообластная методика, реализованная с использованием подвижных криволинейных адаптивных сеток, представлена в ч. 1 книги [8]; ее уместно называть методикой Годунова—Забродина—Прокопова.

Атмосферу работы над методикой иллюстрирует эпизод из книги воспоминаний С.К. Годунова [9], посвященный поиску ответа на вопрос, важно ли решать задачу Римана с учетом соседства четырех ячеек, имеющих общую вершину, или можно ограничиться учетом соседства ячеек только по ребрам разностной сетки. После исследований и обсуждений с участием С.К. Годунова, И.М. Гельфанда, К.В. Брушлинского в двумерной методике реализована грубая модель с учетом соседства ячеек только по ребрам сетки. Печатных материалов, относящихся к этому вопросу, не сохранилось. Недавно в [10] доказано, что при замене точного решения многомерной задачи о распаде произвольного разрыва на решение одномерных задач с данными слева и справа от грани каждой ячейки (т.е. без учета неодномерного характера течения в окрестности вершин ячейки) вносимая погрешность имеет первый порядок малости по времени на гладких решениях. Тем самым получено обоснование применения классической схемы Годунова в многомерном случае для ячеек с плоскими гранями. В рассматриваемой здесь методике ребра ячеек сетки могут быть как прямолинейными отрезками, так и дугами окружностей. Последний случай теоретически не обоснован, но применяется в расчетных исследованиях.

К настоящему времени методика обеспечивает расчеты нестационарных двумерных уравнений газовой динамики на подвижных криволинейных сетках. Она до сих пор служит для решения прикладных задач, связанных с расчетными исследованиями аэрокосмических изделий, взрывных воздействий, процессов образования планетных систем и др.

Авторы данной статьи включились в работу в 1983 г. на этапе создания однотемпературного компьютерного кода для обеспечения исследований по проблеме инерциального тяжелоионного синтеза (ИТИС) [11-14]. Для расчета термоядерных микромишеней ИТИС в 1990 гг. был создан параллельный код для многопроцессорной вычислительной системы с распределенной памятью. Создание методики трехтемпературной газодинамики H3T (Hydrodynamics with Three Temperature) было завершено в начале 2000гг. годов. В ее разработке участвовали Г.Б. Алалыкин, Е.А. Забродина, Г.Н. Новожилова, Л.А. Плинер, Г.П. Прокопов и др.

К настоящему времени работоспособность инерциального метода термоядерного синтеза можно считать доказанной. В декабре 2022 г. на установке NIF (США) впервые удалось осуществить реакцию самоподдерживающегося термоядерного синтеза; при облучении сферической дейтериево-тритиевой микромишени диаметром 2 мм выделилось больше энергии, чем использовалось на ее зажигание [15].

Разработка методики Н3Т проводилась на основе концепции, сформулированной С.К. Годуновым. Согласно этой концепции вычислительная модель является не просто разностной аппроксимацией дифференциальных уравнений, но представляет собой дискретный аналог физико-математической модели изучаемого явления. Это означает, что разностная схема должна отражать физические закономерности исследуемого процесса: законы сохранения, закон возрастания энтропии на ударной волне, сохранение симметрий исходной дифференциальной задачи.

Последнее свойство, в частности, инвариантность относительно группы вращений, обеспечено и в реализации трехтемпературного приближения. Несоблюдение этого свойства может приводить к эффектам, заметно искажающим физическую картину изучаемых процессов. Впервые инвариантная разностная схема для двумерных нестационарных уравнений газовой динамики в плоском и осесимметричном случаях построена именно в методике Годунова-Забродина-Прокопова, см. [8, гл. IV]. Для трехмерных нестационарных уравнений Эйлера такая схема построена А.С. Шведовым [16, 17]. Это направление, как и включение в методику алгоритмов повышенной точности на основе решения обобщенной задачи Римана (И.С. Меньшов [18]), мы рассматривать не будем.

Основное внимание в данной статье уделяется алгоритмической реализации трехтемпературного приближения, в котором сплошная среда описывается как газ с единой плотностью и общим вектором скорости частиц. Сохраняя прежние возможности методики, код НЗТ позволяет проводить моделирование физически содержательных течений сплошной среды в одно-, двух- и трех- температурных приближениях. Методика может быть адаптирована для применения в различных двухтемпературных моделях, используемых для описания лазерно-плазменных процессов, электрон-фононного взаимодействия в полупроводниках. Однако описание трехтемпературной методики, представленное в [2-6], не является достаточно полным. Данная статья восполняет указанный пробел.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ТРЕХТЕМПЕРАТУРНОЙ ГАЗОДИНАМИКИ

Для случая трехтемпературной модели сплошная среда, где протекают физические процессы, состоит из трех видов частиц: ионов, электронов и фотонов (это частицы, моделирующие перенос энергии излучения). При описании уравнений и параметров среды мы для определенности имеем в виду многооболочечные сферические или цилиндрические термоядерные микромишени ИТИС [2-6, 11-14].

Сплошная среда описывается как газ с единой плотностью частиц ho и общим вектором скорости $ec{u}$. Массой электронов пренебрегаем по сравнению с массой ионов, а фотоны считаются не имеющими массы. Температура T, давление ρ и удельная внутренняя энергия ϵ (приходящаяся на единицы массы среды) свои для каждого сорта частиц и являются функциями координат и времени. Переменные T, p, ε , а также связанные с ними коэффициенты уравнений, отмечены индексами i, e, f соответственно.

Система дифференциальных уравнений такой модели среды в переменных Эйлера имеет вид [2]:

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{p} \vec{u} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\vec{u}\vec{u}) + \operatorname{grad} p = 0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon_i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \varepsilon_i \vec{u}) + p_i \operatorname{div} \vec{u} = \operatorname{div}(K_i \operatorname{grad} T_i) + c_{ei}(T_e - T_i) + Q_i, \tag{3}$$

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\vec{u}\vec{u}) + \operatorname{grad} p = 0,$$

$$\frac{\partial(\rho\epsilon_{i})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\epsilon_{i}\vec{u}) + p_{i}\operatorname{div}\vec{u} = \operatorname{div}(K_{i}\operatorname{grad} T_{i}) + c_{ei}(T_{e} - T_{i}) + Q_{i},$$

$$\frac{\partial(\rho\epsilon_{e})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\epsilon_{e}\vec{u}) + p_{e}\operatorname{div}\vec{u} = \operatorname{div}(K_{e}\operatorname{grad} T_{e}) + c_{ei}(T_{i} - T_{e}) + c_{ef}(T_{f} - T_{e}) + Q_{e},$$
(4)

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon_f)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \varepsilon_f \vec{u}) + p_f \operatorname{div} \vec{u} = \operatorname{div}(K_f \operatorname{grad} T_f) + c_{ef}(T_e - T_f) + Q_f.$$
(5)

Уравнения рассматриваются в ограниченной области пространства при физически разумных краевых и начальных условиях. Левые части этих уравнений описывают процессы, изучаемые в газовой динамике. В правой части диффузионные слагаемые вида $\operatorname{div}(K\operatorname{grad}T)$ описывают перенос тепла ионами и электронами и процесс диффузии энергии излучения в приближении "серой материи". Следующие слагаемые в правой части уравнений (3)—(5) моделируют релаксационные процессы обмена энергией между ионами и электронами, электронами и фотонами. Участвующие в их описании коэффициенты релаксации c_{ei}, c_{ef} , также как и коэффициенты теплопроводности K_i, K_e, K_f , могут зависеть от искомых функций, пространственных переменных и времени. Детальное описание этих коэффициентов приведено в [3]. Для представления о характере нелинейности коэффициентов, приведем только их качественную форму:

$$K_i = \kappa_{io} T_i^{5/2} / \Lambda_{ii}, \quad K_e = \kappa_{eo} T_e^{5/2} / \Lambda_{ei}, \quad K_f = \kappa_{fo} T_f^3 l,$$

 $c_{ei} = \kappa_{ei} \rho^2 \Lambda_{ei} / T_e^{3/2}, \quad c_{ef} = \kappa_{ef} \rho^2 (T_f^2 + T_e^2) (T_f + T_e) / T_e^{3.5}.$

Коэффициенты κ_{io} , κ_{eo} , κ_{fo} , κ_{ei} , κ_{ef} зависят от средних атомных весов и зарядов веществ, а также от различных констант (скорости света, постоянной Стефана—Больцмана и др.) и системы единиц, которая используется в расчетах. Кулоновские логарифмы Λ_{ii} , Λ_{ei} и длина свободного пробега l зависят от искомых функций ρ , T_i , T_e , T_f .

Введем оператор L равенством

$$L\begin{pmatrix} T_i \\ T_e \\ T_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla \cdot K_i \nabla + c_{ei} I & -c_{ei} I & 0 \\ -c_{ei} I & -\nabla \cdot K_e \nabla + (c_{ei} + c_{ef}) I & -c_{ef} I \\ 0 & -c_{ef} I & -\nabla \cdot K_f \nabla + c_{ef} I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_i \\ T_e \\ T_f \end{pmatrix}, \tag{6}$$

полагая здесь, что коэффициенты теплопроводности и релаксации определены по значениям температуры и плотности с нижнего слоя по времени. Этот оператор является линейным эллиптическим самосопряженным и неотрицательно определенным (при содержательных ограничениях на коэффициенты и краевые условия, которые учтены обычным образом в определении оператора и правых частях).

Члены $Q = \{Q_i, Q_e, Q_f\}$ в правых частях уравнений (3)—(5) учитывают энерговложение в ионы, электроны и фотоны от различных источников (термоядерные реакции в топливе и нейтронно-ядерные реакции в делящемся веществе тяжелой оболочки мишени в случае гибридной мишени).

В систему (1)—(5) входят уравнение неразрывности (1), векторное уравнение импульса и подсистема трех уравнений теплопроводности. Величина p в этой системе представляет суммарное давление частиц: $p=p_i+p_e+p_f$. Уравнение (2) можно записать в инвариантной форме $\partial(\rho\vec{u})/\partial t+\operatorname{div}\Pi=0$ где Π — тензор плотности потока импульса; поток вектора импульса $\rho\vec{u}$ в направлении единичного вектора \vec{n} есть $p\vec{n}+(\vec{u},\vec{n})\rho\vec{u}$. Уравнения (3), (4) описывают изменения внутренней энергии ионов и электронов соответственно, уравнение (5) — изменение энергии изучения в диффузионном приближении.

Согласно [13] уравнение (5) может быть записано для плотности энергии излучения $U= \rho \epsilon_f$; оно описывает безмассовый газ с показателем адиабаты $\gamma_f=4/3$, уравнением состояния $p_f=(1/3)\rho \epsilon_f$, $U=\sigma T_f^4$, здесь $\sigma-$ постоянная Стефана—Больцмана.

Если сложить уравнения (3)—(5) и ввести результирующие величины $\varepsilon = \varepsilon_i + \varepsilon_e + \varepsilon_f \ Q = Q_i + Q_e + Q_f$, $-\vec{W} = K_i \operatorname{grad} T_i + K_e \operatorname{grad} T_e + K_f \operatorname{grad} T_f$ то получим уравнение изменения суммарной внутренней энергии ε :

$$\partial(\rho \varepsilon)/\partial t + \operatorname{div}(\rho \varepsilon \vec{u}) + p \operatorname{div} \vec{u} = -\operatorname{div} \vec{W} + Q.$$
 (7)

Так же, как в обычной газодинамике, как следствие получается уравнение изменения кинетической энергии и дивергентная форма закона сохранения полной энергии [2]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho(\varepsilon + 0.5|\vec{u}|^2) \right] + \operatorname{div} \left[\left(\rho(\varepsilon + 0.5|\vec{u}|^2) + p \right) \vec{u} \right] = -\operatorname{div} \vec{W} + Q. \tag{8}$$

Величина $e = \rho(\epsilon + 0.5|\vec{u}|^2)$ представляет полную энергию среды единичного объема. Согласно принципам расчета разрывных решений на подвижных сетках, при определении закона движения поверхностей разрыва должен использоваться закон сохранения полной энергии (8) с целью обеспечения закона возрастания энтропии. Для реализации схемы годуновского типа Г.П. Прокопов разработал модификации задачи о распаде разрыва для трехтемпературной среды, см. [2, 19].

Отметим, что разностная аппроксимация системы уравнений (1)—(5) записывается в криволинейной локальной подвижной системе координат. Такая запись обеспечивает, в частности, инвариантность разностных уравнений относительно группы вращений. Система для нахождения искомых величин на новый момент времени $t+\tau$ окажется переопределенной (семь уравнений для определения шести неизвестных). Поэтому уравнение для температуры ионов можно исключить, а энергию ионов определять из уравнения для полной энергии. Мы используем метод расшепления, основанный на интегрировании по времени гиперболической подсистемы с помощью обобщенной на трехтемпературной случай схемы Годунова и параболической подсистемы из трех уравнений теплопроводности с помощью явно-итерационной чебышёвской схемы [20]. Параболический этап трактуется как предварительный, нужный для получений тепловых потоков с целью их использования в завершающих процедурах расчета временного шага. В итоге результирующая схема на дискретном уровне обеспечивает выполнение законов сохранения массы, импульса и полной энергии.

Система уравнений (1)—(5) дополняется уравнениями состояния для каждой из трех компонент среды ko = i, e, f: $p_{ko} = p_{ko}(\rho, \varepsilon_{ko}), \varepsilon_{ko} = \varepsilon_{ko}(\rho, T_{ko}), p_{ko} = p_{ko}(\rho, T_{ko}).$

В качестве основного варианта используются уравнения состояния в "двучленной" форме, удобной для решения на интерфейсах ячеек элементарных задач Римана о распаде произвольного разрыва:

$$p_i = \left[(\gamma_i - 1)\varepsilon_i + c_{oi}^2 \right] \rho - \rho_{oi} c_{oi}^2, \quad p_e = \left[(\gamma_e - 1)\varepsilon_e + c_{oe}^2 \right] \rho - \rho_{oe} c_{oe}^2, \quad p_f = (\gamma_f - 1)\rho\varepsilon_f$$

с заданными константами ρ_{oi} , ρ_{oe} , c_{oi} , c_{oe} . Кроме того, для обеспечения правильной аппроксимации скорости звука в общем уравнении состояния среды полагается, что показатели адиабаты для ионов и электронов одинаковы, т.е. $\gamma_i = \gamma_e = \gamma$. Трехтемпературная модель в качестве общего уравнения состояния среды использует "двучленное" уравнение $p = \left[(\gamma - 1)\varepsilon + c_0^2 \right] \rho - \gamma p^0$ с некоторыми эффективными параметрами $p^0 = \rho_0 c_0^2 / \gamma$ и c_0 , ρ_0 . Адиабатическая скорость звука вычисляется по формуле $c_a = \sqrt{\gamma(p+p^0)/\rho}$, суммарное давление и внутренняя энергия есть $p = p_i + p_e + p_f$ и $\varepsilon = \varepsilon_i + \varepsilon_e + \varepsilon_f$ соответственно. Уравнения состояния электронов и ионов удобно задавать в следующем виде: $p_i = (\gamma - 1)\rho\varepsilon_i$, $\varepsilon_i = R\cdot T_i\cdot Z/\left(A\cdot (Z+1)\right)$, $p_e(\gamma-1)\varepsilon_e$, $\varepsilon_e = R\cdot T_e\cdot Z/\left(A\cdot (Z+1)\right)$, где Z— порядковый номер элемента в периодической системе, A— его атомный вес.

Для описания геометрии задается начальное положение границ всех областей задачи. При t_0 задаются начальные данные для u,v,ρ,ϵ , где внутренняя энергия ϵ — векторная величина: $\epsilon=(\epsilon_i,\epsilon_e,\epsilon_f)$. На границах всех областей могут быть заданы граничные условия, зависящие от времени: давление и температура, давление и тепловой поток, скорость и температура, скорость и тепловой поток и др. Каждая граница может быть подвижна, и ее закон движения либо известен заранее, либо определяется во время расчета. Учет теплопереноса через внутреннюю границу предполагает выполнение равенства температур и тепловых потоков. Граничные условия на внутренних и внешних границах, включающие температуру и/или тепловой поток, задаются для каждого компонента среды.

3. ОСНОВНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ РАСЧЕТНОЙ МЕТОДИКИ

Общая схема расчета движения сплошной среды основана на декомпозиции (при необходимости) области решения Ω на подобласти. Эта операция включает три этапа: геометрическое разбиение исходной расчетной области на подобласти (введением дополнительных границ), движение границ на каждом шаге по времени, построение сетки в каждой подобласти. Разбиение исходной области на подобласти определяется в основном необходимостью ее представления набором "топологических четырехугольников". Несколько подобластей могут объединяться в структуру, называемую ярусом, если при этом объединении сохраняется топология четырехугольника, а сами подобласти составляют в ярусе прямоугольную решетку. На этапе расчета теплопроводности несколько ярусов могут объединяться в счетные объекты, называемые кластерами, в которых сквозным образом осуществляется расчет теплопереноса. Заметим, что между ярусами могут быть пустоты, как например, в задаче соударения пластин при моделировании сварки взрывом. Эта задача входила в близкий круг интересов С.К. Годунова, и авторы данной статьи проводили при участии С.К. Годунова расчетные исследования процесса высокоскоростного соударения в газодинамическом приближении.

Каждая из подобластей является либо физической областью с заданными материальными параметрами, либо ее частью. Принадлежностями области являются ячейки, границы, физические параметры (параметры уравнения состояния, вид коэффициентов теплопроводности и т.д.).

В каждом ярусе строится четырехугольная криволинейная сетка, индуцированная двумя семействами координатных линий. Внутренние и внешние границы ярусов могут представлять выделенные разрывы в искомом решении. Как правило, выделяются контактные разрывы, основные ударные волны. Если ярус разделен на несколько областей, то именно границы областей служат опорными для построения координатных линий. Стороны четырехугольников аппроксимируются дугами окружностей или отрезками прямых [8]. Кривизна ребра

задается углом, равным половине центрального угла, стягивающего ребро. Объединение полученных четырехугольников, называемых ячейками сетки, составляет элементарную счетную область Ω_h . Сетка в каждом ярусе строится на каждом шаге по времени либо интерполяцией, либо минимизацией некоторого вариационного функционала [8].

Отметим, что интерес С.К. Годунова к проблеме построения класса вариационных квазиизометрических сеток, см. [21, 22], возник, в том числе, в связи с обсуждением проблемы моделирования микромишеней термоядерных синтеза.

Построенная в расчетной области разностная сетка называется геометрической или исходной, она задается декартовыми координатами своих узлов и метрическими параметрами ребер. Центр ячейки определяется как точка, в которой дуги окружностей, соединяющие середины противоположных ребер, пересекаясь, делятся пополам.

Расчетная сетка является подвижной. Сетку на фиксированный момент времени t_i будем называть t_i -слоем. Конструируемая система разностных уравнений связывает величины на двух слоях — на t_i (нижнем) и t_{i+1} = $t_i + \tau$ (верхнем). Шаг по времени τ переменный и определяется ограничениями, диктуемыми газодинамикой, см. [8]. Подсистема уравнений теплопроводности интегрируется с помощью явно-итерационной схемы ЛИ-М [20] с шагом по времени т, величина которого ограничена газодинамическим условием устойчивости (см. [8]) гиперболической подсистемы, т.е. $\tau \approx \tau_{\rm conv}$, обычно с некоторым запасом, например, $\tau = 0.5\tau_{\rm conv}$. В рамках методики НЗТ интегрирование с таким шагом в задачах ИТИС является вполне допустимым в силу следующих соображений. Динамику микромишеней можно условно разделить на два этапа. На первом этапе происходит сжатие холодной мишени. На втором этапе в сжатом термоядерном топливе возникает интенсивное энерговыделение, и топливо нагревается до высокой температуры. На этом этапе становится существенной роль теплопроводных процессов и релаксации температур. Первый этап является длительным по времени (до 90% от всего времени существования микромишени). На этом этапе ограничение на шаг по времени, диктуемое параболическим условием устойчивости явной схемы, $\tau \approx \tau_{\rm diff}$, является более слабым, чем конвективное, динамическое ограничение $\tau \approx \tau_{\rm conv}$. Поэтому преимущество схемы ЛИ-М при расчете таких процессов проявляется очень ярко: интегрирование по времени ведется с шагом $\tau = 0.5 \tau_{\rm conv}$ и на первом этапе схема ЛИ-М автоматически превращается в явную схему. На втором этапе, где существенную роль играет теплопроводность, т.е. $\tau_{\rm diff} \ll \tau$, схема ЛИ-М выполняет тоже автоматически (без подбора эмпирических параметров) внутренний цикл явных итераций, число q которых определяется верхней границей λ_{\max} оператора теплопроводности и шагом т по формуле $q \simeq \sqrt{\tau/\tau_{\rm diff}} \simeq \sqrt{\tau \lambda_{\rm max}}$.

Сетка на каждом слое строится по определенным правилам: сначала вычисляется положение всех границ счетной области на момент времени t_{j+1} , а затем строится сама сетка. На каждом слое по времени вычисляются сеточные функции: (u,v) — декартовы компоненты скорости, ρ — плотность, ε — удельная внутренняя энергия, T — температура. В рассматриваемой модели переменные ε и T являются вектор-функциями. Величины (u,v,ρ,ε) считаются постоянными по ячейке и, как и температура T, относятся к центрам ячеек.

Формулы перехода на верхний слой $t = t_{j+1}$ строятся на основе дискретизации системы (1)—(5), записанной в форме законов сохранения в локальной криволинейной системе координат. Такая запись соответствует фундаментальным принципам, развитым С.К. Годуновым, о термодинамически согласованных уравнениях, образующих симметрические гиперболические системы, составленные из дивергенций — законов сохранения.

Схема строится для каждой ячейки геометрической сетки на интервале времени от t_j до $t_{j+1}=t_j+\tau$ с учетом движения этой сетки. Ячейка сетки топологически представляет собой куб в трехмерном пространстве x,y,t: его нижним и верхним основаниями являются, соответственно, ячейки на плоскостях $t=t_j$ и $t=t_{j+1}$, а четырьмя боковыми гранями — некоторые поверхности, образуемые в результате перемещения криволинейных ребер ячейки за время τ .

Для вычисления величин на момент $t_j+\tau$, т.е. на верхней грани каждой ячейки, кроме известных величин на нижней грани, необходимо знать газодинамические и тепловые потоки через боковые грани. Эти потоки на каждой из боковых граней предполагаются постоянными в течение всего временного шага τ . Газодинамические потоки на боковых гранях находятся по величинам, полученным из решения задачи о распаде разрыва. К таким величинам относятся нормальная и касательная к боковой грани компоненты вектора скорости $\vec{U}=(U,V)$, плотность вещества R, его давление P и внутренняя энергия E, тепловой поток. Значения первых четырех из перечисленных величин находятся из решения задачи об адиабатическом или изотермическом распадах разрыва [2,3].

Возможны ситуации, когда не во всех, а лишь в некоторых областях, используется трехтемпературное приближение. В других же областях может использоваться двухтемпературная или однотемпературная модели. С точки зрения задачи о распаде разрыва это означает, что на границах между такими областями возникает необходимость проведения расчета, когда слева и справа от разрыва количество компонент для моделирования

среды может быть различным. Основной вклад в разработку теории и алгоритмов решения таких обобщенных задач о распаде разрыва внес Г.П. Прокопов.

Тепловые потоки находятся в процессе решения системы трех уравнений теплопроводности, см. разд. 4. В дальнейшем применяются следующие обозначения: $J,\ \hat{J}$ — площадь нижней и верхней граней пространственно-временной ячейки соответственно, J_{ij} — длина ребра ij ячейки (или площадь боковой грани, связанной с этим ребром) на слое $t+0.5\tau,\ U_{ij}^*$ — скорость этого ребра сетки в направлении внешней нормали, U_{ij}^n — нормальная компонента вектора скорости среды, $\alpha_{ij},\ \beta_{ij}$ — компоненты единичной нормали n_{ij} в средней точке криволинейного отрезка между узлами i и j сетки на плоскости $t=t_j$. Величины на верхнем слое t_{j+1} отмечены крышкой, на среднем слое — верхней чертой, величины на нижнем слое t_j не имеют черты. Величины, принадлежащие центру верхней или нижней ячейки сетки, отмечены индексом "0". Для трехтемпературного случая энергия, давление, температура представляют "наборы" из трех величин, отвечающих трем компонентам среды.

Суммарное давление на ребре ij и суммарная внутренняя энергия складываются из ионной, электронной, фотонной компонентов соответственно: $\overline{P}_{ij}=(\overline{P}_i+\overline{P}_e+\overline{P}_f)_{ij}, \overline{E}_{ij}=(\overline{\epsilon}_i+\overline{\epsilon}_e+\overline{\epsilon}_f)_{ij}$. Так же получается суммарный тепловой поток на ребре $\bar{\Delta}_{ij}=(\bar{\Delta}^i+\bar{\Delta}^e+\bar{\Delta}^f)_{ij}$. Дополнительно при переходе от t_j к $t_j+\tau$ может осуществляться покомпонентно вложение (или выделение) тепловой энергии в ионы, электроны, фотоны. Полное вложение энергии получается сложением вклада энергии отдельных компонент $Q=Q_i+Q_e+Q_f$.

Векторная форма записи дискретной системы уравнений имеет вид (для простоты записи ограничимся случаем "плоского" течения в декартовой системе координат):

$$\frac{\hat{J}\hat{f} - Jf}{\tau} = -A^{\text{flux}},\tag{9}$$

где $f = (\rho, \rho u, \rho v, e, \rho \varepsilon_e, \rho \varepsilon_f)$, а поток A^{flux} через границу ячейки имеет следующие компоненты:

$$A^{\text{flux}} = (A^{\rho}, A^{\rho u}, A^{\rho v}, A^{e}, A^{\rho \varepsilon_{e}}, A^{\rho \varepsilon_{f}}). \tag{10}$$

Компоненты e и A^e , входящие в f и $A^{\rm flux}$, это полная энергия среды единичного объема, $e=\rho(\epsilon+0.5|\vec{u}|^2)$ и ее поток. Здесь переменная $\epsilon=\epsilon^i+\epsilon^e+\epsilon^f$. В простейшем случае (без учета источников и релаксационных членов) поток $A^{\rm flux}$ есть сумма газодинамических и тепловых потоков через четыре боковые грани ячейки. Обозначим этот поток через $A^{\rm flux}_{\rm surf}$. Его составляющие, потоки через каждую грань ячейки в направлении вектора внешней нормали n_{ij} в единицу времени есть векторные величины с компонентами

$$A_{ij}^{\rho} = J_{ij} \left[\overline{R} (\overline{U}^n - \overline{U}^*) \right]_{ij},$$

$$A_{ij}^{\rho u} = J_{ij} \left[\overline{R} (\overline{U}^n - \overline{U}^*) \overline{U} + \alpha \overline{P} \right]_{ij},$$

$$A_{ij}^{\rho v} = J_{ij} \left[\overline{R} (\overline{U}^n - \overline{U}^*) \overline{V} + \beta \overline{P} \right]_{ij},$$

$$A_{ij}^{e} = J_{ij} \left[\overline{R} (\overline{U}^n - \overline{U}^*) (\overline{E} + (\overline{U}^2 + \overline{V}^2)/2) + \overline{P} \overline{U}^n \right]_{ij} + \overline{\Delta}_{ij},$$

$$(11)$$

где $\overline{E}=\overline{\epsilon}_i+\overline{\epsilon}_e+\overline{\epsilon}_f$, $\bar{\Delta}_{ij}=\bar{\Delta}_{ij}^i+\bar{\Delta}_{ij}^e+\bar{\Delta}_{ij}^f$. В качестве p_e^* , p_f^* используются величины не на боковых гранях, а в центре ячейки, взятые на нижнем временном слое t_j : $p_e^*=(p_e)_0=p_e(\rho_0,\epsilon_{e0}), p_f^*=(p_f)_0=p_f(\rho_0,\epsilon_{f0}).$

Формулы имеют ясный физический смысл и задают потоки массы, импульса и энергии через поверхность, определенную криволинейным отрезком ij при его перемещении во времени со скоростью U_{ij}^* . В общем случае в формулы для $A^{\rho \varepsilon_i}$, $A^{\rho \varepsilon_e}$, $A^{\rho \varepsilon_e}$, из (10), (11), кроме потоков через боковые грани, входят также слагаемые $Q_{k_0}J$ и $R_{k_0}(T_i,T_e,T_f)J$, описывающие источники энергии и релаксационные члены, здесь $k_0=i,e,f$. Заметим, что поток $A^{\rho \varepsilon_i}$ входит в расчет потока A^e полной энергии. Поэтому окончательно имеем

$$A^{\rho \varepsilon_i} = A_{\text{surf}}^{\rho \varepsilon_i} + R_i (T_i, T_e, T_f) \hat{J} + Q_i \hat{J},$$

$$A^{\rho \varepsilon_e} = A_{\text{surf}}^{\rho \varepsilon_e} + R_e (T_i, T_e, T_f) \hat{J} + Q_e \hat{J},$$

$$A^{\rho \varepsilon_f} = A_{\text{surf}}^{\rho \varepsilon_f} + R_f (T_i, T_e, T_f) \hat{J} + Q_f \hat{J}.$$
(12)

Слагаемое $Q=Q_i+Q_e+Q_f$ — объемный интеграл от суммарной вкладываемой энергии, и оно входит также в выражение $A^e=A^e_{\rm surf}+Q\hat{J}$, относящееся к потоку полной энергии. Детальная запись разностных уравнений в криволинейной системе координат является достаточно громоздкой и полностью приведена в [8].

4. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

В трехтемпературном случае $(\Delta^i, \Delta^e, \Delta^f)_{ij}$ представляют тепловые потоки через грани ячеек для трех компонентов среды. Ниже излагается реализация схемы (9) в части нахождения температур и тепловых потоков и используются обозначения:

$$T = (T_i, T_e, T_f), \quad \varepsilon = (\varepsilon_i, \varepsilon_e, \varepsilon_f), \quad \Delta = \Delta^i + \Delta^e + \Delta^f, \quad Q = Q_i + Q_e + Q_f.$$

Напомним, что нижние индексы (i, e, f) относятся к величинам в центрах ячеек, верхние — к потокам через боковую поверхность.

Разделим систему на две подсистемы, принимая некоторые упрощения, в виде

$$\frac{\hat{J}f^g - Jf}{\tau} = -A^g + Q\hat{J},\tag{13}$$

$$\frac{\hat{J}\hat{f} - \hat{J}f^g}{\tau} = -\Delta(\overline{T}) + R(\overline{T})\hat{J}.$$
(14)

Подсистема (13) есть результат дискретизации уравнений газодинамики без учета переноса тепла теплопроводностью. Здесь $f^g=(\hat{\rho},\hat{\rho}\hat{u},\hat{\rho}\hat{v},\hat{\rho}\epsilon_e^g,\hat{\rho}\epsilon_e^g,\hat{\rho}\epsilon_f^g)$ — результат решения системы (13), не содержащей членов, описывающих тепловые потоки и релаксационные процессы. Подсистема (14), наоборот, содержит опущенные члены. Этот прием — разностный аналог расщепления по процессам: в сумме уравнения (13), (14) дают исходную систему (9). В (13) $A^g=(A^p,A^{pu},A^{pv},A^{gi},A^{ge},A^{gf})$ — газодинамические потоки. Энергию Q можно распределить между подсистемами, но для упрощения описания мы относим ее к гиперболической подсистеме (13). В формулу (14) входит некоторая температура \overline{T} . Если взять эту температуру с нижнего слоя по времени, то получим явную схему с обременительным ограничением на величину шага по времени $\tau \simeq h^2$, где h — параметр, характеризующий сетку, например, минимальный диаметр пространственной ячейки. Ниже мы покажем, как делается переход на верхний слой по времени с помощью явно-итерационной чебышёвской схемы ЛИ-М.

Уравнения подсистемы (14) можно записать для сеточных вектор-функций $\varepsilon=(\varepsilon_i,\varepsilon_e,\varepsilon_f)$ и $T=(T_i,T_e,T_f)$ в виде

$$\frac{\hat{J}\hat{\rho}(\hat{\epsilon} - \epsilon^g)}{\tau} = -\Delta(\overline{T}) + R(\overline{T})\hat{J}. \tag{15}$$

Так как удельная энергия ε связана с T уравнением состояния $\varepsilon=E(\rho,T)$, то (15) можно рассматривать как нелинейную неявную разностную схему относительно векторной сеточной функции \overline{T} . Заметим, что эти три уравнения связаны между собой, так как релаксационный член $R(\overline{T})$ связывает сразу все компоненты температуры T или их попарные комбинации. В [2] приведен алгоритм решения нелинейной системы алгебраических уравнений (15), основанный на дальнейшем расщеплении системы (15): сначала с помощью схемы ЛИ-М на шаге по времени решаются три уравнения теплопроводности в отсутствии процессов релаксации температур, т.е. при $R(\overline{T})$ $\hat{J} \equiv 0$, затем решается нелинейная система в отсутствии тепловых потоков, т.е. при $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ связывается нелинейная система в отсутствии тепловых потоков, т.е. при $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ связывается нелинейная система в отсутствии тепловых потоков, т.е. при $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ связывается нелинейная система в отсутствии тепловых потоков, т.е. при $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$ связывает сразувается нелинейная система в отсутствии тепловых потоков, т.е. при $R(\overline{T})$ $R(\overline{T})$

Поэтому выбран алгоритм совместного расчета процессов теплопроводности и релаксации, т.е. решение дискретной параболической подсистемы, отвечающей дискретизации оператора (6) и обеспечивающей выполнение трех соотношений (15). На шаге по времени эта подсистема возникает при аппроксимации редуцированных дифференциальных уравнений трехтемпературной теплопроводности. В операторном виде эту систему можно записать в виде

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = L_h T,\tag{16}$$

где оператор L_h есть результат дискретизации дифференциального оператора (6). В (16) производная по времени берется вдоль траектории пространственной точки, в алгоритме интегрирования по времени оператор L_h в (16) считается линейным: коэффициенты теплопроводности и релаксации, зависящие от температуры и плотности, определяются этими переменными с нижнего слоя.

Разностная аппроксимация потока тепла Δ_{ij} через внутреннее ребро ij основана на аппроксимации поля температуры в окрестности ребра многочленом (линейным, квадратичным или квадратично-кубическим). Аппроксимация выполняется в локальной криволинейной системе координат, связанной с ребром сетки, и обеспечивает сохранение симметрий. Детальное описание различных способов построения такой аппроксимации дано в [23, 24]. Разработанные дискретные аппроксимации L_h являются консервативными и сохраняют свойство самосопряженности в сеточном аналоге скалярного произведения $L_2(\Omega_h)$. Для сохранения неотрицательной определенности дискретного оператора L_h достаточно обеспечить нестрогое диагональное преобладание.

При сильных искажениях сетки это удается выполнить с помощью перехода на аппроксимации, приводящие к пятиточечным разностным шаблонам.

Переходим к описанию многошаговой процедуры решения уравнения (16), схеме ЛИ-М. Для согласования с (15) перепишем уравнение (16) в виде

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = D_h T + R_h T,\tag{17}$$

где

$$D_{h} = \frac{1}{\hat{J}\hat{\rho}} \begin{pmatrix} \nabla \cdot K_{i} \nabla & 0 & 0 \\ 0 & \nabla \cdot K_{e} \nabla & 0 \\ 0 & 0 & \nabla \cdot K_{f} \nabla \end{pmatrix}, \quad R_{h} = \frac{1}{\hat{\rho}} \begin{pmatrix} c_{ei}I & -c_{ei}I & 0 \\ -c_{ei}I & c_{ei}I + c_{ef}I & -c_{ef}I \\ 0 & -c_{ef}I & -c_{ef}I \end{pmatrix}.$$
(18)

Запишем схему ЛИ-М для вектор-функций ε и T в виде:

$$\stackrel{(k)}{\varepsilon} = \frac{1}{1 + \tau b_k} \left\{ \varepsilon^g + \tau b_k \stackrel{(k-1)}{\varepsilon} + \tau D_h \stackrel{(k-1)}{T} + \tau R_h \stackrel{(k-1)}{T} \right\}, \quad \stackrel{(k)}{T} = F \stackrel{(k)}{\varepsilon}, \quad k = 1, \dots, q, \tag{19}$$

где ε^g — внутренняя энергия после расчета гиперболического этапа (13), $\varepsilon^{(k)}$, T — итерационные приближения, k — номер внутреннего шага (итерации), F — функция, определяемая уравнением состояния $\varepsilon = E(\rho, T)$; начальное приближение T — температура с нижнего слоя, операторы D_h , R_h определены в (18).

Для нахождения T по найденным значения $\mathfrak{e}^{(k)}$ в (19) используется линеаризация уравнения состояния для каждой температурной функции. А именно, используется аппроксимация уравнения состояния вида $E(\rho,T)\cong E(\rho_0,T_0)+\partial E/\partial T\cdot (T-T_0)$. Здесь ρ_0,T_0 — известные значения сеточных функций — плотность и температура на нижнем слое t_j в текущей ячейке; $\partial E/\partial T$ вычисляется по значениям ρ_0,T_0 в той же ячейке.

Пусть $AK = \partial E/\partial T$ и $BK = E(\rho_0, T_0) - T_0\partial E/\partial T$. Тогда температура T легко находится из соотношения $E = AK \cdot T + BK$.

Число итераций (шагов) q в схеме (19) определяется величиной шага по времени и коэффициентами разностной аппроксимации по известному правилу. С помощью этих величин определяется набор параметров $\{b_k\}$ в итерациях (19). Среди них по построению есть нулевой; при выборе $b_q=0$ легко видеть, что последняя итерация эквивалентна шагу явной схемы. Это означает, что схема ЛИ-М может быть представима в виде процедуры "предиктор-корректор" — предиктор вычисляет \overline{T} по формулам (19), в которых отсутствует итерация с $b_q=0$, а корректором является явная схема (15). Для энергии ионов окончательная коррекция делается после реализации явной схемы, отвечающей закону сохранения полной энергии, в котором тепловой поток в правой части получен суммированием тепловых потоков, полученных в схеме (19) на последней итерации.

Обобщение (19) схемы ЛИ-М на рассматриваемый векторный случай оказывается работоспособным. Можно попытаться внести в (19) элемент неявности заменой R_h T на R_h T и находить T из решения линейной системы размерности 3×3 относительно трех неизвестных функций: T_i , T_e , T_f . Проведенные численные расчеты для модельного простейшего уравнения $u_t=u_{xx}-a\cdot u$, a>0 показали, что такой прием ухудшает точность. Поэтому расчетная схема реализована в каноническом варианте (19) со следующими дополнениями. По формуле (19) вычисляется промежуточная температура \overline{T} и тепловые потоки на ребрах ячеек $\Delta(\overline{T})$ — это этап "предиктор". Найденные значения подставляются в систему уравнений (15) и находятся все три компонента внутренней энергии на верхнем слое, отвечающие аппроксимации уравнения сохранения внутренней энергии (7). Но навязывание сохранения внутренней энергии эквивалентно закону сохранения энтропии [2]. На сильных разрывах это противоречит принципу возрастания энтропии, закон движения разрывов должен базироваться на законе сохранения полной энергии. Поэтому с помощью введенных в разд. 3 аппроксимаций и определенных в этом разделе тепловых потоков, мы реализуем расчет уравнения полной энергии (8). Из решения этого уравнения дополнительно получаем новые значения внутренней энергии ионов. По внутренней энергии частиц каждого сорта находим температуру с помощью уравнения состояния. Если уравнение состояния является нелинейным, то температура находится ньютоновскими итерациями.

Обсудим схему ЛИ-М (19) более подробно. Ее конструкция диктуется исключительно требованием аппроксимации и устойчивости, что принципиально отличает эту схему от чебышёвского ускорения сходимости итерационных процессов, применяемых для решения эллиптических уравнений или для решения неявных схем для параболических уравнений, см. [20]. Для построения нужного многочлена Чебышёва $F_p(L_h)$ степени p необходимо задать верхнюю границу λ_{\max} спектра сеточного оператора L_h . Эта граница находится по теореме Гершгорина о кругах спектра, т.е. на основе расчета сумм модулей шаблонных коэффициентов, отвечающих

оператору L_h . Зависимость λ_{\max} от h известна: $\lambda_{\max} \simeq h^{-2}$. Многочлен $F_p(\lambda)$ строится на отрезке $[0;\lambda_{\max}]$, исходя из условий устойчивости и аппроксимации точного оператора послойного перехода $\exp(-\tau\lambda)$. В частности, выполнено $F_p(0)=1$, $\left|F_p(\lambda)\right|\leq 1$. С помощью многочлена F_p оператор послойного перехода S схемы LINS можно записать в виде рациональной функции оператора L_h [20]:

$$S(L_h) = (I - F_p^2(L_h)) \cdot (I + \tau L_h)^{-1}.$$

Оператор S переводит решение с нижнего слоя по времени на следующий слой и реализуется циклом, состоящим из q=2p-1 элементарных шагов. Каждый из них по трудоемкости эквивалентен одному шагу явной схемы. Множитель $(I+\tau L_h)^{-1}$ в S есть оператор послойного перехода чисто неявной схемы. На спектре оператора L_h выполнено важное неравенство $0 \le S(\lambda) \le (1+\tau\lambda)^{-1}$, что следует из свойств многочлена F_p . Это неравенство означает, что вычислительная устойчивость схемы ЛИ-М не хуже, чем у неявной схемы. Напомним, что для устойчивости достаточно выполнение более слабого неравенства $|S(\lambda)| \le 1$.

В [20] приведено строгое изложение и обоснование конструкции чебышёвского многочлена F_p . Важно, что степень многочлена определяется без участия эмпирических параметров формулой $p = \arg\min\left[{\rm ctg}^2(0.25\pi/p) - \tau \cdot \lambda_{\rm max}\right], p \in Z^+$. Этой точной формулой следует пользоваться для аккуратного перехода схемы ЛИ-М в явную схему при $\tau\lambda_{\rm max} \approx 1$. Обозначив $\lceil x \rceil = \min\{n \in Z: n \geq x\}$, можно записать удобную для практического использования приближенную формулу

$$p = \left\lceil 0.25\pi\sqrt{\tau\lambda_{\max} + 1} \right\rceil.$$

Параметры b_k в итерациях (19) определены как $\{b_1,\ldots,b_q\}=\{a_1,\ldots,a_{p-1},a_1,\ldots,a_p\}$ где $a_m=\lambda_{\max}(z_1-\beta_m)/(1+z_1),\ z_1=\cos(0.5\pi/p),\ m=1,\ldots,p$, выражаются через корни β_m многочлена Чебышёва I рода степени p из множества $K_p=\{\cos\left((i-0.5)\pi/p\right),i=1,2,\ldots,p\}$. Это множество K_p упорядочено для устойчивости [24], причем так, что $a_p=0$.

Строгий результат, важный для практики параллельных вычислений, состоит в следующем. Вместо ограничения $\tau \simeq O(h^2)$, диктуемого явной схемой, эффективный размер временного шага схемы ЛИ-М при $\tau \sim h$ составляет в терминах вычислительных затрат величину $O(h^{3/2})$. Формально величина шага τ не ограничена, так как схема ЛИ-М сохраняет устойчивость при любом значении $\tau > 0$. Однако в нестационарных высокотемпературных задачах интегрирование с шагом $\tau \sim \mathrm{const} \cdot h$ часто является физически содержательным ограничением. Схема ЛИ-М прошла тщательную проверку на тестовых и практических задачах, подтвердив высокую точность и монотонность.

Отдельного упоминания заслуживает процедура расчета коэффициентов теплопроводности на ребрах (интерфейсах) ячеек. Рассмотрим случай, когда любой из коэффициентов теплопроводности можно записать в виде произведения двух функций $f(\rho,r)$ и S(T): $\kappa(T,\rho,r)=f(\rho,r)\cdot S(T)$, причем функция f может быть разрывной по пространственной координате r; искомая плотность $\rho(t,r)$ тоже может быть разрывной (контактный разрыв). Функция S(T) является непрерывной. На решениях типа тепловых волн она является линейной в окрестности фронта.

Пусть $\kappa^m = \kappa(T^m, \rho^m, r^m)$ — значения коэффициента теплопроводности в центре ячейке с одной стороны ребра (—) и с другой стороны (+). Обозначим через h^m расстояния (длины дуг) от центров ячеек до середины ребра, где мы намерены вычислить коэффициент теплопроводности, и обозначим суммарную длину как $h = h^- + h^+$. Введем интерполяционные приближения в виде средних арифметических значений

$$K^- = \frac{h^+ \kappa(T^-, \rho^-, r^-) + h^- \kappa(T^+, \rho^-, r^-)}{h}, \quad K^+ = \frac{h^- \kappa(T^+, \rho^+, r^+) + h^+ \kappa(T^-, \rho^+, r^+)}{h},$$

а в качестве коэффициента теплопроводности K на ребре берем среднее гармоническое значение этих приближений

$$K = \frac{K^- K^+ h}{K^- h^+ + K^+ h^-}.$$

В [25] Р.П. Федоренко показал, что при расчете тепловых волн именно такая комбинированная аппроксимация приводит к корректному описанию — не препятствует правильному движению тепловой волны (как это происходит в случае среднего гармонического усреднения) и не приводит к погрешности на контактных разрывах (как в случае среднего арифметического усреднения). Для случая представления $\kappa(T, \rho, r) = f(\rho, r)S(T)$ и равномерной сетки имеем

$$K = \frac{2f^{-}f^{+}}{f^{-} + f^{+}} \frac{S(T^{-}) + S(T^{+})}{2}.$$

Код Н3Т обеспечивает расчеты реакций горения термоядерного топлива. При описании термоядерного горения микромишеней из смеси дейтерия и трития учитываются 4 реакции с участием дейтерия, трития и гелия в предположениях, что мишень прозрачна для нейтронов и энергия выделяется локально в точке реакции. Система уравнений кинетики термоядерного горения детально представлена в [13, 14]. Модель и расчеты с учетом нейтронно-ядерного горения представлены в [27]. Отметим, что методика Н3Т может быть приспособлена для расчетов задач, алгоритм решения которых связан с движением основных разрывов и динамической перестройкой блочно-неструктурированной сетки, см. [28].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена история создания методики численного моделирования двумерных нестационарных течений теплопроводного газа в трехтемпературном приближении и основные алгоритмы с детализацией схемы решения системы уравнений теплопроводности с учетом релаксации температур. Показано, что в трехтемпературной методике сохраняется идейная и алгоритмическая основа газодинамической методики, у истоков которой стоял С.К. Годунов. Методика реализована в виде параллельного кода для многопроцессорных компьютеров. Численная схема использует подвижные криволинейные адаптивные сетки, обеспечивает выполнение законов сохранения и симметрий дифференциальной задачи, что повышает эффективность методики при моделировании сложных высокотемпературных динамических процессов. Основное назначение — обеспечение расчетных исследований по проблеме управляемого термоядерного синтеза, но возможно использование и в других приложениях вычислительной аэро-газодинамики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Жуков В.Т., Забродин А.В., Феодоритова О.Б.* Метод решения двумерных уравнений динамики теплопроводного газа в областях сложной формы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1993.Т.33. № 8. С. 1240—1250.
- 2. *Забродин А.В., Прокопов Г.П.* Методика численного моделирования двумерных нестационарных течений теплопроводного газа в трехтемпературном приближении // Вопр. атомной науки и техн. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1998. Вып. 3. С. 3—16.
- 3. Алалыкин Г.Б., Жуков В.Т., Забродин А.В., Забродина Е.А., Новожилова Г.Н., Плинер Л.А., Прокопов Г.П., Феодоритова О.Б. Методика численного моделирования двумерных нестационарных течений теплопроводного
 газа в трехтемпературном приближении в областях сложной формы с подвижными границами (НЗТ). М.:
 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, отчет НИР 8-1-04, 2004, 244 с.
- 4. *Гиззаткулов Н.М.* Разностная схема для двумерных нестационарных уравнений газовой динамики в трехтемпературном приближении // Матем. моделирование. 2004. Т. 16. № 10. С. 107—119.
- 5. *Гиззаткулов Н.М.* Численное моделирование двумерной нестационарной газовой динамики в трехтемпературном приближении с учетом нейтронного и термоядерного горения // Дисс. . . . канд. физ.-матем. наук. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 2005.
- 6. *Жуков В.Т.* Развитие вычислительных моделей динамики мишеней термоядерного синтеза. // Дисс. докт. физ.-матем. наук. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 2010.
- 7. *Годунов С.К.* Разностный метод численного расчета разрывных решений газодинамики // Матем. сборник. 1959. Т. 47(89). № 3. С. 271—306.
- 8. Численное решение многомерных задач газовой динамики. Под ред. С. К. Годунова / С. К. Годунов, А. В. Забродин, М. Я. Иванов [и др.]. М.: Наука, 1976. С. 400.
- 9. Годунов С.К. Воспоминания о разностных схемах. Новосибирск: Науч. Книга. 1997. С. 40.
- 10. *Тишкин В.Ф., Жуков В.Т., Мышецкая Е.Е.* К обоснованию схемы Годунова в многомерном случае // Матем. моделирование. 2016. Т. 28. № 2. С. 86–96.
- 11. Разработка энергетической установки синтеза и деления на основе микромишеней прямого действия и мощного тяжелоионного драйвера / Н.Н. Алексеев, М.М. Баско, Е.А. Забродина [и др.] // Атомная энергия. 2004. Т. 97. № 3. С. 200—209.
- 12. *Долголева Г.В.*, *Забродин А.В.* Кумуляция энергии в слоистых системах и реализация безударного сжатия. М.: Физматлит, 2004. 70 с.

- 13. *Баско М.М.* Уравнения одномерной радиационной гидродинамики с теплопереносом и гидродинамикой горения. М.: Препринт ИТЭФ. 1985. № 145. С. 58.
- 14. *Баско М.М.* Тяжелоионные мишени инерциального термоядерного синтеза // Дисс.... докт. физ.-матем. наук. М.: 1995.
- 15. Abu-Shawareb H. et al. Achievement of Target Gain Larger than Unity in an Inertial Fusion Experiment // Phys. Rev. Lett. 132, 065102, 2024.
- 16. *Шведов А.С.* Инвариантные разностные схемы для уравнений газовой динамики // Докл.АН СССР. 1987. Т. 292. № 1. С. 46—50.
- 17. Шведов А.С. Разностная схема для уравнений газовой динамики, сохраняющая групповые свойства решений // Матем. заметки. 1990. Т. 4. Вып. 4. С. 140—151.
- 18. *Меньшов И.С.* Повышение порядка аппроксимации схемы Годунова на основе решения обобщенной задачи Римана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1987. Т. 27. № 12. С. 1853—1860.
- 19. *Прокопов Г.П.* Задача о распаде разрыва в трехтемпературной газовой динамике // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2004. № 66. С. 28.
- 20. Жуков В.Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Матем. моделирование. 2010. Т. 22. № 10. С. 127—158.
- 21. *Годунов С.К., Жуков В.Т., Феодоритова О.Б.* Численный метод квазиизометрической параметризации для двумерных криволинейных областей // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2020. Т. 60. № 4. С. 578—589.
- 22. *Godunov S.K.*, *Feodoritova O.B.*, *Zhukov V.T.* On one class of quasi-isometric grids // Advances in Grid Generation. New York: Nova Science Publishers. 2007. P. 53–69.
- 23. Жуков В.Т., Феодоритова О.Б. Разностные схемы для уравнения теплопроводности на основе локальных среднеквадратичных приближений // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 1989. № 97. 19 с.
- 24. *Жуков В.Т., Феодоритова О.Б.* Разностные схемы решения нестационарного двумерного уравнения теплопроводности на криволинейных сетках и их реализация на параллельной вычислительной системе // Вопр. атомной науки и техн. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 1992. Вып. 3. С. 66—71.
- 25. *Лебедев В.И.*, *Финогенов С.А.* О порядке выбора итерационных параметров в чебышёвском циклическом методе // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1971. Т. 11. № 2. С. 425–438.
- 26. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. Долгопрудный: Изд. дом Интеллект, 2008. 503 с.
- 27. Жуков В.Т., Забродина Е.А., Имшенник В.С., Масленников М.В., Николаева О.В. Моделирование гибридной микромишени инерциального тяжелоионного синтеза с учетом нейтронно-ядерных реакций // Вопр. атомной науки и техн. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2014. Вып. 2. С. 45—58.
- 28. *Веселова Е.А., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К.* Методика ЛОГОС-ВОЛНА расчета двумерных задач газовой динамики с учетом теплопроводности на подвижных неструктурированных сетках // Вопр. атомной науки и техн. Сер. Матем. моделирование физ. процессов. 2021. Вып. 4. С. 50–66.

SCHEME FOR CALCULATING UNSTEADY FLOWS OF HEAT-CONDUCTING GAS IN A THREE-TEMPERATURE APPROXIMATION

V. T. Zhukov*, O. B. Feodoritova**

Keldysh Institute of Applied Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Miusskaya sq., 4, Moscow, 125047 Russia *e-mail: vic.zhukov@mail.ru,

**e-mail: feodor@kiam.ru Received 10 March, 2024 Revised 10 March, 2024 Accepted 05 May, 2024

Abstract. A numerical modeling technique for unsteady flows of heat-conducting gas in a three-temperature approximation is presented. The methodology is based on the foundational principles of S.K. Godunov. For time integration, each time step is computed by splitting the governing equations into hyperbolic and parabolic subsystems. The first subsystem is solved using a generalized Godunov scheme, while the second uses an explicit-iterative Chebyshev scheme. Adaptive, curvilinear moving grids are used for discretization, and the discrete scheme is formulated in curvilinear coordinates, preserving the symmetries of the differential problem. The methodology is implemented as a parallel code for multiprocessor computers. Its primary purpose is to support computational studies in controlled thermonuclear fusion, though it can also be applied to other areas of computational aerogas dynamics.

Keywords: numerical modeling, high-temperature gas dynamics, multi-temperature models, finite difference schemes, Godunov scheme, Chebyshev iterations.