Международная конференция «Современные проблемы механики», посвященная 80-летию академика А. Г. Куликовского



Схема Годунова 60 лет спустя

С.К. Годунов

(доклад подготовлен по совместным работам с Пешковым И.М., Киселевым С.П., Мали В.И. и Куликовым И.М.)

18 марта 2013 г., МИАН, г. Москва

Одномерные уравнения газовой динамики

Уравнение состояния:
$$\rho_0 E = \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma(\gamma-1)} \left(\frac{\sigma(S)}{V}\right)^{\gamma-1}$$

 $p = -E_v(V,S)$ $p_v = -E_{vv}(V,S)$ $[V(p,S)]_p = -\frac{1}{E_{vv}(V,S)} = -\frac{1}{a^2(V,S)}$
 $\left[\rho_0 E(V,S) + \frac{\rho_0 u^2}{2}\right]_u = \rho_0 u \times$
 $-\left[\rho_0 E(V,S) + \frac{\rho_0 u^2}{2}\right]_v = p \times$
 $\left[\frac{\partial V}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial m} = 0$
 $\left[\frac{\partial S}{\partial t} = 0$
 $\frac{\partial \rho_0 \left(E + \frac{u^2}{2}\right)}{\partial t} + \frac{\partial p u}{\partial m} = 0$
 $\frac{\partial \rho_0 \left(E + \frac{u^2}{2}\right)}{\partial t} + \frac{\partial p u}{\partial m} = 0$
 $\frac{\partial \rho_0 \left(E + \frac{u^2}{2}\right)}{\partial t} + \frac{\partial p u}{\partial m} = 0$
ECли предположить, что $a = \sqrt{E_{vv}(V,S)} = const$
то система II перепишется в виде:
 $\frac{\partial}{\partial t} \left(u - \frac{p}{a}\right) - a \frac{\partial}{\partial m} \left(u - \frac{p}{a}\right) = 0$

Эти соображения используются при конструировании дискретной вычислительной модели

Одномерные уравнения газовой динамики



Одномерные уравнения газовой динамики

Если
$$E(V,S)$$
 выпукла по V то $E_{S} > 0$ $S^{n+\frac{1}{2}} \ge S_{n+\frac{1}{2}}$
 $\rho_{0}E\left(V^{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_{0}\frac{\left(u^{n+\frac{1}{2}}\right)^{2}}{2} \le \rho_{0}E\left(V_{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_{0}\frac{\left(u_{n+\frac{1}{2}}\right)^{2}}{2} + \frac{\tau}{m_{n+1} - m_{n}}\left(P_{n+1}U_{n+1} - P_{n}U_{N}\right)$
 $\rho_{0}E\left(V^{n+\frac{1}{2}}, S^{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_{0}\frac{\left(u^{n+\frac{1}{2}}\right)^{2}}{2} = \rho_{0}E\left(V_{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_{0}\frac{\left(u_{n+\frac{1}{2}}\right)^{2}}{2} + \frac{\tau}{m_{n+1} - m_{n}}\left(P_{n+1}U_{n+1} - P_{n}U_{N}\right)$

В нашей дискретной модели несмотря на **линеаризованные распады разрывов** справедлив **закон неубывания энтропии**

Изложенная конструкция почти дословно переносится на двух-трехмерные задачи и использовалась в упругой модели о которой речь пойдет ниже

В работе (Годунов, Манузина, Назарьева, ЖВМиМФ, 2011) экспериментально исследовалась слабая сходимость классической схемы Годунова при $h \to 0$ и получены порядки точности $h^{0.8}$ для u,V и $h^{0.5}$ для S.

В чем причина? (пока не выяснено)

В описанной **выше** модели — число точек, на которые размазывается ударная волна, **зависит от её амплитуды**, но не зависит от **шага сетки**.

Исследования должны быть продолжены.

Эйлеровы координаты:

$$x^{i} = x^{i} \left(\underbrace{\xi_{1}, \xi_{2}, \xi_{3}}_{\gamma}, t \right)$$

лагранжевы координаты

Обычно используемый тензор деформации (симметричный)

$$CC^{T}$$

$$\left\{\frac{\partial x^i}{\partial \xi^j}\right\} = \left\{C^i_j\right\} = C$$

Тензор дисторсии (несимметричный)

Мы будем использовать в качестве тензора деформации (симметричный)

Уравнение состояния упругой среды ho_{0} *E* – энергия деформации единицы объема

Для изотропной среды мы предлагаем выражать ho_{0} через инварианты тензора деформации

$$\rho_0 E = \rho_0 E \left\{ \det \sqrt{CC^T}, tr \left[\sqrt{CC^T} - \frac{1}{3} tr \left(\sqrt{CC^T} \right) I_3 \right]^2, \sigma(S) \right\} \qquad \left(\begin{array}{c} \det \sqrt{CC^T} = \det C > 0 \\ S & - \text{Энтропия} \end{array} \right)$$

Учет «доисторической» пластической деформации

$$C - дисторсия \qquad \frac{\partial C_i^j}{\partial t} = \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j}, \qquad \qquad \frac{dx^i}{dt} = u^i \qquad \qquad C_j^i\Big|_{t=0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Если среда в «доисторическое» время (t < 0) подвергалось деформациям (не обязательно упругим), то мы будем считать, что при t > 0 надо использовать «эффективную» дисторсию

$$D = CB, \qquad D_{j}^{i} = c_{k}^{i} b_{j}^{k}, \qquad D|_{t=0} = B = \begin{pmatrix} b_{1}^{i} & b_{2}^{i} & b_{3}^{i} \\ b_{1}^{2} & b_{2}^{2} & b_{3}^{2} \\ b_{1}^{3} & b_{2}^{3} & b_{3}^{3} \end{pmatrix}$$

При этом, мы предполагаем, что $ho_0 E$ зависит не от дисторсии С, а от «эффективной дисторсии» D = CB

$$\rho_0 E = \rho_0 E \left\{ \det(CB), tr\left[\sqrt{CBB^T C^T} - \frac{1}{3}tr\left(\sqrt{CBB^T C^T}\right)I_3\right]^2, \sigma(S) \right\}$$

Используемая нами реализация этой формулы приведена на следующем слайде

$$\rho_0 E = \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma(\gamma - 1)} \Big[\sigma(S) \det^{-(\gamma - 1)}(CB) + (\gamma - 1) \det(CB) \Big] - \rho_0 c_1^2 tr \Big[\sqrt{CBB^T C^T} - \frac{1}{3} tr \Big(\sqrt{CBB^T C^T} \Big) I_3 \Big]$$

Нам в дальнейшем понадобятся матрицы, составленные из производных от $ho_0 E$

$$E_{C_i^j C_k^l} = b_\alpha^i E_{D_\alpha^j D_\beta^l} b_\beta^k \qquad \qquad E_{C_i^j} = E_{D_\beta^j} b_\beta^i$$

Их расчет нужно начинать с вычисления матриц $E_{D_{i}^{j}D_{i}^{l}}$ $E_{D_{i}^{j}}$,

оно проводится после перехода к ортогональному **базису**, в котором **собственные числа** матрицы $\sqrt{DD^T} = \sqrt{CBB^TC^T}$ равны k_1, k_2, k_3 , а **уравнение состояния** записывается в виде:

$$\rho_0 E = \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma(\gamma - 1)} \Big[\sigma(S)(k_1 k_2 k_3)^{-(\gamma - 1)} + (\gamma - 1)(k_1 k_2 k_3) \Big] + \frac{2\rho_0 c_1^2}{3} \Big[k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 - k_1 k_2 - k_2 k_3 - k_3 k_1 \Big]$$

После вычисления всех нужных производных в этом базисе они преобразуются к базису исходному. На этом завершается расчет производных $E_{D'D'_{L}}$ $E_{D'}$,

После этого вычисляются

$$E_{C_i^j C_k^l} = b_\alpha^i E_{D_\alpha^j D_\beta^l} b_\beta^k \qquad \qquad E_{C_i^j} = E_{D_\beta^j} b_\beta^i$$

Вот как выглядит в специальном базисе матрица
$$P_0 E_{D_{\alpha}^j D_{\beta}^l}$$
, если $\sqrt{DD^T} = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{pmatrix}$

Она положительно определена, если:

1)
$$\left\{E_{k_ik_j}\right\} > 0$$
 2) $\frac{E_{k_i} - E_{k_j}}{k_i - k_i} > 0$ **3)** $\frac{E_{k_i} + E_{k_j}}{k_i + k_i} > 0$

Уравнения теории упругости записываются в следующем виде:

$$u^{i} \times \frac{\partial \rho_{0} u_{i}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \xi^{j}} \Big[\rho_{0} E_{C_{j}^{i}} \Big] = 0$$

$$\rho_{0} E_{C_{i}^{j}} \times \frac{\partial C_{j}^{i}}{\partial t} - \frac{\partial u^{i}}{\partial \xi^{j}} = 0$$

$$T \times \frac{\partial \rho_{0} S}{\partial t} = 0$$

следствие этих уравнений (закон сохранения энергии)

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_0 \frac{u^i u_j}{2} + \rho_0 E\right] - \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[u^i_i \rho_0 E_{C^i_j}\right] = 0\right)$$

Моделируемые уравнения

Тензор напряжений: $\pi'_{j} = \rho_{0} E_{C_{i}}$ Уравнения : $\frac{\partial \rho_0 u_i}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[\rho_0 E_{C_j^i} \right] = 0 \qquad \qquad \frac{\partial C_j^i}{\partial t} = \frac{\partial C_j^i}{\partial \pi_l^k} \frac{\partial \pi_l^k}{\partial t}$ $\left(\rho_{0}E_{C_{j}^{i}}\right)_{C_{l}^{k}}\frac{\partial C_{l}^{k}}{\partial t}=\frac{\partial \pi_{j}^{i}}{\partial C_{l}^{k}}\frac{\partial C_{l}^{k}}{\partial t}=\frac{\partial \pi_{j}^{i}}{\partial t}$ $\frac{\partial C_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} = 0$ $\frac{\partial \rho_0 S}{\partial t} = 0, \qquad \frac{\partial b_j^i}{\partial t} = 0 \qquad \frac{\partial C_l^k}{\partial t} = \left(\rho_0 E_{c_j^i c_l^k}\right)^{-1} \frac{\partial \pi_j^i}{\partial t}$ $\left(\rho_0 E_{C_i^i C_i^k}\right)^{-1} = \Psi$ Уравнение $\frac{\partial C_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} = 0$ мы перепишем в виде $\Psi \frac{\partial \pi_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} = 0$ Все наши расчеты используют уравнения упругости в следующей форме: $\begin{pmatrix} \rho_0 I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 & & \\ 0 &$

а также (на заключительном этапе расчете шага по t) сохранение энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_0 \frac{u^i u_j}{2} + \rho_0 E \right] - \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[u_i^i \pi_j^i \right] = 0$$
¹⁰

Исходная система уравнений

$$\begin{pmatrix} \rho_0 I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & &$$

Для расчета «распадов разрывов» на границах ячеек (в точках •) используются одномерные системы (расщепление исходной системы)



Структура ячеек лагранжевой сетки

$$\underbrace{\boldsymbol{k} = 1, 2, 3}_{\boldsymbol{k} = 1, 2, 3} \qquad \begin{pmatrix} \rho_0 \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ 0 & \begin{bmatrix} E_{c_i^{\boldsymbol{k}} c_j^{\boldsymbol{k}}} \end{bmatrix}^{-1} \end{pmatrix} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \pi^{[\boldsymbol{k}]} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{k} = 1, 2, 3} - \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi^{\boldsymbol{k}}} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \pi^{[\boldsymbol{k}]} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{k} = 0} = 0$$

Одномерная система:

Распад разрыва на границе между соседними ячейками

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B} \ \mathbf{S} \mathbf{Y} \mathbf{E} \mathbf{X} \mathbf{X} & \pi = \begin{pmatrix} \pi_1^{[k]} \\ \pi_2^{[k]} \\ \pi_3^{[k]} \end{pmatrix}, \quad u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}, \quad \Lambda = \Lambda^{[k]} \ \mathbf{\Pi} \mathbf{O} \mathbf{C} \mathbf{T} \mathbf{O} \mathbf{S} \mathbf{H} \mathbf{H} \mathbf{H} \mathbf{H} \end{pmatrix}$$



Уравнения

 $\Lambda \frac{\partial \pi}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial \xi} = 0$ $\Lambda = \Lambda_{+}$ в правой или верхней ячейке $\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial \pi}{\partial \xi} = 0$ $\Lambda = \Lambda_{-}$ в левой или нижней ячейке

переписываются в каждой ячейке через римановы инварианты

$$\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) = 0 \\ \Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) = 0 \\ \xi > 0 \\ \Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi - u \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \pi - u \right) = 0 \\ \xi < 0.$$

Уравнения для римановых инвариантов:

И

$$\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) = 0 \\ \left\{ \xi > 0 \right\}$$

$$\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi + u \right) = 0 \\ \left\{ \xi > 0 \right\}$$

$$\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi - u \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{+}^{\frac{1}{2}} \pi - u \right) = 0 \\ \left\{ \xi > 0 \right\}$$

$$\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi - u \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{-}^{\frac{1}{2}} \pi - u \right) = 0 \\ \left\{ \xi > 0 \right\}$$

На границе $\xi = 0$ скорость U и напряжение Π вычисляются из системы:

$$\begin{cases} \Lambda_{\frac{1}{2}}^{[k]}\Pi^{[k]} + U^{[k]} = \Lambda_{\frac{1}{2}}^{[k]}\pi^{[k]} + u^{[k]} \\ \Lambda_{\frac{1}{2}}^{[k]}\Pi^{[k]} - U^{[k]} = \Lambda_{\frac{1}{2}}^{[k]}\pi^{[k]} - u^{[k]} \end{cases}$$



При допустимом шаге по времени (условие Куранта) пересчитываются эйлеровы координаты граничных точек 🔴

$$x(t+ au) = x(t) + au U$$

вычисляются в центрах ячеек $C_{j}^{i}(t+ au) = \frac{\Delta x^{i}}{\Delta \xi_{j}}$ и $u^{i}(t+ au) = u^{i}(t) + au \frac{\Delta \Pi_{i}^{j}}{\Delta \xi^{j}}$

Энтропия в центрах ячеек $S(t+\tau) = S(t)$ (пока не меняется, 13 изменение будет описано позже)

По каждой ячейке на шаге $t + \tau$ проверяется выполнение закона сохранения энергии \Box

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| \rho_0 \frac{u^i u_j}{2} + \rho_0 E \right| - \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[u_i^i \rho_0 E_{C_j^i} \right] = 0$$

и проводится его коррекция путем выбора энтропии $S\left(t+ au
ight)$

Эта коррекция также как и в случае одномерной газодинамической схемы обеспечивает неравенство

$$\frac{\partial S}{\partial t} \ge 0$$
 при условии положительной определенности матрицы $\left\{ E_{C_{j}^{i}C_{l}^{k}} \right\}$

Для процесса релаксации мы можем, не меняя k_i , подобрать b_i ,

$$k_1 k_2 k_3 = k_1 k_2 k_3 b_1 b_2 b_3 = k_1 k_2 k_3$$

аннулируя тем самым девиатор, что эквивалентно действию максвелловских релаксаций. Этот прием значительно ускоряет вычислительный процесс и является реализацией моделирования пластических деформаций по Прандтлю (1928 г.)



На этой задаче мы будем демонстрировать результаты модельных расчётов



Проведение расчёта с ещё большим **мельчением** сетки позволило убедиться, что **опасная точка**, в которой отказывает расчётная модель, осталась на том же месте

Мы сначала обсудим причину «АВОСТА» (граница области применимости уравнения состояния), а затем опишем продолжение расчета методом молекулярной динамики 16





Имеет место полное совпадение результатов расчета!

Модель молекулярной динамики Волны при соударении алюминиевых пластин, ИТПМ СО РАН

В численном расчете длина волны $\lambda = 586 \overset{0}{\mathrm{A}}$, Расчет длины волны по формуле Кудинова $\lambda_{\kappa} = 26\delta \sin^2(\gamma/2) = 624 \overset{0}{\mathrm{A}}$

 $t = 53 \,\mathrm{ps}$ $t = 75 \,\mathrm{ps}$



 $t = 90 \, \text{ps}$



 $t = 135 \, \text{ps}$



Модель молекулярной динамики ИТПМ СО РАН Рентгеновский снимок во время процесса ИГиЛ СО РАН





Киселев, Мали, ФГВ, 2012, Т. 48, №2



Рентгеновский снимок во время взрывного эксперимента (ИГиЛ СО РАН)

Условия корректности уравнения состояния



Расчет контроля применимости уравнения состояния



t = 0.17

Введение релаксационного процесса ведёт к появлению остаточных деформаций, при этом $B = \left\{ b_{ij} \right\} \neq I \quad \left(b_{ij} \neq \delta_{ij} \right)$





Область остаточных деформаций (ярко красная область)

Спасибо за внимание!