

УДК [519.6:53](063)

ББК 22.2в631.7я431(2Рос)+22.3в631.7я431(2Рос)

Т78

**Т78 Труды Семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 1. Вычислительная физика / Под ред. Р. Р. Назирова.— М. : КДУ, 2009.— 288 с. : табл., ил., цв. ил.**

**ISBN 978-5-98227-665-0**

Настоящий сборник основан на докладах, представленных на семинаре «Методы численного моделирования актуальных задач», который проходил 11–13 февраля 2009 г. на базе гостиницы «Интеркосмос» Института космических исследований Российской академии наук (ИКИ РАН). Вычислительные технологии — это новая область научной деятельности, пограничная между традиционной вычислительной математикой и конкретной областью ее применения. Целый ряд естественно-научных задач не может быть эффективно решен простой дискретизацией исходных математических моделей, и требуется использовать априорные представления о моделируемых явлениях для их адекватного воспроизведения и предсказания. Фактически речь идет о модификациях и неформальном использовании методов вычислительной математики. Для успешного проведения таких исследований требуется обмен опытом, идеями среди специалистов, применяющих вычислительные технологии. Цель семинара состояла в обмене мнениями между специалистами, занимающимися численным моделированием актуальных задач физики и механики. В последнее десятилетие фактически сформировалась область науки, известная под названием «вычислительная физика». Она объединяет те фундаментальные исследования, существенная часть которых выполняется с использованием вычислительной техники и вычислительных методов, и является дополняющей к теоретической физике и экспериментальной физике.

This book is based on presentations given on seminar “Computation techniques in topical problems modeling”. This seminar organized by Space Research Institute of the Russian Academy of Sciences took place 11–13 February 2009. Computational technologies are new interdisciplinary scientific activities between traditional numerical mathematics and specific applications. Number important natural sciences problems could not be solved simply by mathematical models discretisations, and a prior thinking on modeled phenomena is needed to represent properly natural phenomena. Practically, the case in point is modification and informal use the methods of numerical mathematics. Exchange of experiences, ideas among scientists using computational technologies is needed to success in such studies. The principal objective of the seminar was to arrange the interactions of researchers working on numerical simulations in physics and mechanics. The new scientific discipline, computational physics, carrying basic research with the use of computing, was formed recently, and is complementary to theoretical and experimental physics.

УДК [519.6:53](063)

ББК 22.2в631.7я431(2Рос)+22.3в631.7я431(2Рос)

**ISBN 978-5-98227-665-0**

© ИКИ РАН, 2009

© Оформление. Обложка. Издательство «КДУ», 2009

## Предисловие

Вычислительные технологии — это новая область научной деятельности, пограничная между традиционной вычислительной математикой и конкретной областью ее применения. Целый ряд естественно-научных задач не может быть эффективно решен простой дискретизацией исходных математических моделей, и требуется использовать априорные представления о моделируемых явлениях для их адекватного воспроизведения и предсказания. Фактически речь идет о модификациях и неформальном использовании методов вычислительной математики. Для успешного проведения таких исследований требуется обмен опытом, идеями среди специалистов, использующих вычислительные технологии.

Настоящий сборник основан на докладах, представленных на семинаре «Методы численного моделирования актуальных задач», который проходил 11–13 февраля 2009 г. на базе гостиницы «Интеркосмос» Института космических исследований Российской академии наук. Цель семинара состояла в обмене мнениями между специалистами, занимающимися численным моделированием актуальных задач физики и механики. В последнее десятилетие фактически сформировалась область науки, известная под названием «вычислительная физика». Она объединяет те фундаментальные исследования, существенная часть которых выполняется с использованием вычислительной техники и вычислительных методов и является дополняющей к теоретической и экспериментальной физике. В 1996 г. Международный союз физиков IUPAP создал комиссию по вычислительной физике, основной задачей которой является координация проведения конференций по вычислительной физике и выработка аналитической документации. Международные конференции по вычислительной физике проводятся ежегодно с ротацией места проведения по географическому признаку: Европа, Америка, Азия. Последняя конференция прошла в августе 2008 г. в Бразилии, следующая будет в декабре 2009 г. на Тайване, а за ней последует конференция в Норвегии в 2010 г. Научная общественность высказывает пожелание о проведении одной из ближайших конференций в России. Одна из задач семинаров состоит в создании площадки для неформального общения российских специалистов в области компьютерных технологий с целью привлечения молодежи в эту важную область деятельности.

В первом из планируемой серии семинаров приняли участие и признанные специалисты, и молодые сотрудники, которые представили более половины докладов.

Доклады сгруппированы по близости тематик и разбиты на четыре сессии.

Первая сессия была посвящена исследованию методов организации вычислений. Оказывается, для исследования методов вычислений можно применить аппарат теоретической физики. Например, процесс десинхронизации процессоров при проведении распределенного моделирования в некотором смысле аналогичен процессу образования шероховатости поверхности, выращиваемой методом молекулярной эпитаксии [1]. Другой пример показывает, как методы нелинейных динамических систем и статистической механики могут быть использованы для построения генераторов случайных чисел с высокой производительностью [2]. Интерес к обеим задачам связан с проектом разработки компьютеров нового поколения, так называемых петафлопных компьютеров. Третий доклад первой секции [3], посвященный особенностям построения современных грид-сетей, по ряду причин будет опубликован в следующем сборнике.

На второй сессии рассмотрели моделирование физико-химических процессов, происходящих в приповерхностном слое. Оказывается, влияние каталитических процессов на распределение температуры весьма важно для расчета свойств теплозащиты космических аппаратов [4]. Для моделирования таких процессов создан вычислительный комплекс, основанный на методе молекулярной динамики [7]. Для исследования таких процессов также разработан метод, основанный на динамической модели с применением метода Монте-Карло [5]. Развивается также подход на основе моделирования из первых принципов с применением метода функционала плотности [6].

Третья сессия была посвящена применению гидродинамических методов для исследования широкого спектра задач. Это исследование космической плазмы методом крупных вихрей [8], модель переноса аэрозолей в планетарном пограничном слое [9], теория переноса пассивного скаляра в случайном потоке [10], моделирование набегания ударной волны на береговую линию [11], двухслойная модель вращения жидкости над сложной границей дна [12], испарение лежащей на поверхности капли капиллярного размера [13]. Разработанные методы имеют важное теоретическое значение, при этом они применяются для исследования практических задач и в ряде случаев имеют хорошее совпадение с экспериментом.

Наконец, в последней сессии акцент был сделан на численном исследовании критических явлений. Это задача роста случайных структур на поверхности [14], неравновесная динамика ферромагнетиков [15], исследование влияния коррелированных дефектов на свойства спиновых моделей [16] и параметрический резонанс в двухспиновой системе.

- [1] *Л. Н. Шур, М. А. Новотный*. Эволюция горизонта времен при параллельных вычислениях.
- [2] *Л. Ю. Бараш, Л. Н. Шур*. Генераторы случайных чисел. Реализация на основе команд SSE.

- [3] *А. В. Жучков.* Особенности современного построения грид-сети на примере виртуальной организации «Цифровая маммография».
- [4] *В. Л. Ковалев.* Многомасштабное моделирование гетерогенных каталитических процессов на теплозащитных покрытиях космических аппаратов.
- [5] *А. Н. Якупчиков, В. Л. Ковалев.* Прямое численное моделирование некоторых физико-химических процессов и явлений.
- [6] *А. А. Крупнов, Л. П. Суханов, В. Л. Ковалев.* Моделирование адсорбции атомов кислорода на поверхности  $Al_2O_3$  методом функционала плотности.
- [7] *М. Ю. Погосбекян, В. Л. Ковалев.* Вычислительный комплекс MD-Trajestogies для моделирования гетерогенных каталитических процессов в газе и на поверхности.
- [8] *А. А. Чернышов, К. В. Карельский, А. С. Петросян.* Метод крупных вихрей для исследования космической и астрофизической плазмы.
- [9] *А. С. Петросян, К. В. Карельский, И. В. Смирнов.* Новая модель переноса твердых аэрозолей в планетарном пограничном слое.
- [10] *В. Лебедев, А. Черных.* Перенос пассивного скаляра в пристеночной области случайного потока.
- [11] *А. Г. Славин, К. В. Карельский, А. С. Петросян.* О моделировании течений мелкой воды над произвольной подстилающей поверхностью.
- [12] *К. В. Карельский, А. С. Петросян, А. Г. Славин.* Численное моделирование течений вращающейся мелкой воды.
- [13] *Л. Ю. Бараш, Л. Н. Щур, В. М. Винокур, Т. П. Бигиони.* Испарение и гидродинамика капли капиллярного размера.
- [14] *А. Ю. Меньшутин, Л. Н. Щур.* Критические явления при росте двумерных структур.
- [15] *В. В. Прудников.* Компьютерное моделирование неравновесной критической динамики структурно неупорядоченных ферромагнетиков.
- [16] *П. В. Прудников.* Численное исследование влияния протяженных дефектов структуры на критическое поведение трехмерных систем методом коротковременной динамики.
- [17] *Д. О. Синицын.* Моделирование квантовой динамики двухспиновой системы: параметрический резонанс.

Сборник предназначен для научных работников, аспирантов и студентов, занимающихся вычислительной физикой. Надеемся, что публикация докладов найдет такой же интерес у читателей, какой доклады получили у участников семинара.

## ЭВОЛЮЦИЯ ГОРИЗОНТА ВРЕМЕН ПРИ ПАРАЛЛЕЛЬНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДИСКРЕТНЫХ СОБЫТИЙ

Л. Н. Щур<sup>1, 2, 3, 4</sup>, М. А. Новотный<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук*

<sup>2</sup> *Отдел прикладных сетевых исследований Научного центра РАН в Черноголовке*

<sup>3</sup> *Московский физико-технический институт. E-mail: lev@landau.ac.ru*

<sup>4</sup> *Department of Physics and Astronomy and HPC Center for Computational Sciences, Mississippi State University. E-mail: novotny@hpc.msstate.edu*

Обсуждается эволюция горизонта локальных времен (ГЛВ) при параллельном моделировании дискретных событий (ПМДС). Предложена классификация различных подходов к реализации ПМДС, основанная на аналогии эволюции ГЛВ с решениями уравнения Кардара – Паризи – Жанга. Обсуждается предложенный авторами алгоритм FaS (Freeze-and-Shift — фиксация-и-сдвиг), а также излагается новый вариант оптимистического алгоритма. Также обсуждается аналогия эволюции ГЛВ с эволюцией профиля поверхности при молекулярно-пучковой эпитаксии. Работа выполнена при поддержке ННФ и РФФИ (проекты № 08-07-00328 и 07-07-12053).

### Введение

Параллельное моделирование играет все более важную роль как в фундаментальной науке, так и в экономике. Используемые сегодня реализации параллельных вычислений в основном многошаговые. К настоящему времени уже осознано, что реалистические модели масштабируемого аппаратного обеспечения и программного обеспечения являются в существенной мере динамическими, асинхронными и сильно неоднородными по времени для применяемой сегодня методики синхронизации. Перспективным подходом является декомпозиция процесса моделирования на логические процессы, выполнение которых может синхронизовываться консервативным или оптимистическим подходами, а также их комбинацией, как это делается при параллельном моделировании дискретных событий. Параллельное моделирование дискретных событий (*Fujimoto*, 1990) — выполнение на параллельном компьютере или на кластере компьютеров одной программы для моделирования дискретных событий. Поэтому исследование свойств ПМДС имеет большое значение для развития параллельных методов в целом.

Число применений ПМДС растет в тех областях, где необходимо проведение широкомасштабного моделирования в случаях, когда требуются большие затраты памяти и/или времени. При последовательном выполнении программы симулятор работает в цикле, выбирая событие с минимальным штампом локального времени из листа событий и обрабатывая его. Обработка события может привести к изменению состояния системы в целом, планируя некоторое

число новых событий для моделирования в будущем, при этом необходимо соблюдать соотношения причинности. Преимущество подхода ПМДС состоит в использовании параллелизма для выполнения программы, не нарушая при этом соотношений причинности, т. е. выполнение программы в целом должно следовать некоторому последовательному порядку событий. Моделируемая система разбивается на подсистемы, и выполняющие элементы параллельно производят моделирование заданных подсистем. Подсистемы меняют свое состояние во времени не непрерывно, а в какие-то определенные (дискретные) моменты времени. Изменение состояния подсистемы назовем событием. Основная проблема эффективной организации моделирования системы состоит в том, чтобы соблюдать порядок дискретных событий во времени и при этом не нарушать причинность. Один из подходов для решения этой задачи и составляет существо ПМДС. Система моделируется как набор логических процессов без прямого доступа к переменным, характеризующим состояние системы. Все взаимодействия между логическими процессами (ЛП) моделируются как посылка сообщений между ними об изменении состояния ЛП со штампами времени. Ошибки причинности могут быть исключены, если каждый ЛП следует локальным по отношению к ЛП условиям причинности, и ЛП взаимодействуют друг с другом исключительно обменом сообщениями со штампами времени, без прямого доступа к разделяемой памяти. Уместно ввести понятие локального виртуального времени (*Jefferson*, 1985) для каждого ЛП. Набор локальных виртуальных времен (ЛВВ) можно геометрически трактовать как горизонт времен. Тогда выполнение ПМДС приведет к эволюции горизонта локальных времен в системе отсчета глобального времени. В настоящей работе мы обсуждаем особенности поведения горизонта ЛВВ для различных алгоритмов.

Традиционно реализуются два подхода моделирования: консервативный и оптимистический (*Fujimoto*, 1990). При консервативном подходе каждый ЛП выполняет свою часть программы только после получения всех необходимых сообщений о выполнении некоторого набора данных, необходимого для корректного выполнения операций. Используется принцип — предотвратить возможность любого типа нарушения причинности всего процесса, при этом проверяется безопасность выполнения очередного события. Применяется самый пессимистический прогноз для принятия решения. При оптимистическом подходе применяется протокол обнаружения ошибок и протокол их исправления. Допускаются ошибки причинности, при обнаружении которых запускается протокол исправления, при котором обрабатывается отход назад по времени для исправления нарушенной причинности.

### КОНСЕРВАТИВНЫЙ ПОДХОД

Корнис с соавторами (*Korniss et al.*, 2000) предложили оригинальный метод анализа консервативного подхода. Поясним его на примере одномерной системы. Свяжем каждый ЛП с процессорным элементом (ПЭ) таким образом, что ПЭ составляют цепочку из  $L$  элементов, и ограничимся случаем, при котором обмен

сообщениями со штампами времени происходит только между ближайшими соседями. Как принято, будем считать, что времена наступления событий распределены по Пуассону. Обозначим через  $t_I$  случайный интервал времени между двумя событиями, наступающими в узле номер  $I$  цепочки ( $I = 1, \dots, L$ ). Иными словами,  $t_I$  — случайная величина, распределенная по экспоненциальному закону. Припишем каждому ПЭ с номером  $I$  локальное время (ЛВ)  $h_I(T)$ , где через  $T$  обозначено дискретное глобальное время параллельных шагов, выполняемых параллельно всеми ПЭ. Начальное условие для эволюции  $h_I(0) = 0$ , ( $I = 1, \dots, L$ ). При  $T > 0$  все ЛВ изменяются итеративно, по закону  $h_I(T+1) = h_I(T) + t_I$ , если  $h_I(T) \leq \min\{h_{I-1}(T), h_{I+1}(T)\}$ , в противном случае  $h_I(T+1) = h_I(T)$  (алгоритм КТНР — отсутствие мертвых состояний). Каждый раз, когда ПЭ изменяется, он посылает сообщения со штампом своего локального времени  $h_I(T)$  своим соседям. Это гарантирует, что при вышеописанном алгоритме причинность никогда не нарушается. В алгоритме КТНР невозможно наступление мертвых состояний, поскольку в каждый момент времени найдется элемент с наименьшим локальным временем, который по алгоритму КТНР изменит свое состояние. В этом можно убедиться таким образом. Введем разностную производную  $f_I = h_I - h_{I-1}$  и запишем плотность локальных минимумов в виде

$$u(T) = \frac{1}{L} \sum_{I=1}^L \Theta[-f_I(T)] \Theta[-f_{I+1}(T)].$$

Среднее значение этой величины по случайному процессу равно  $0,246410(7)$ , это, по сути, средняя скорость эволюции горизонта времен. Заметим, что эта величина близка к интуитивному значению  $1/4$ , но несколько отличается по той причине, что эволюция соседних ПЭ не независима. Для нас важно в дальнейшем, что Корнис с соавторами (*Korniss et al., 2000*) указали на связь описанного процесса с уравнением Бюргерса (*Гурбатов и др., 1990*) на переменную  $f_I$  и соответственно переменная  $h_I(T)$  подчиняется уравнению Кардара — Паризи — Жанга для роста поверхности кристалла при молекулярно-пучковой эпитаксии (*Kardar et al., 1986*). Такая аналогия позволяет указать на существенный недостаток алгоритма КТНР. Среднеквадратичная ширина горизонта времен будет расти с глобальным временем по степенному закону с показателем экспоненты  $2/3$ . Таким образом, достоинство алгоритма КТНР соседствует с существенным недостатком в смысле роста с глобальным временем шероховатости поверхности, соответствующей горизонту локальных времен ПЭ. Иными словами, с ростом глобального времени увеличивается разброс локальных времен процессов.

## ОБОБЩЕНИЕ КОНСЕРВАТИВНОГО АЛГОРИТМА

В предыдущей работе (*Novotny, Shchur, 2005*) мы нашли целесообразным провести обобщение консервативного алгоритма. Представим нашу программу как случайный направленный граф, узлами которого являются логические процес-

сы (ЛП), а связями — возможные направления посылки сообщений от одного ЛП другому. Произведем разбиение графа на кластеры таким образом, чтобы число связей внутри кластера было максимально, а между кластерами — минимально. Назовем те ЛП, связи которых лежат лишь внутри кластера, объемными узлами, а те ЛП, которые имеют внешние по отношению к своему кластеру связи, — поверхностными узлами. Отобразим теперь граф на заданную архитектуру вычислительной системы так, чтобы каждому ПЭ соответствовал один кластер. Таким образом, эволюция времен нашей программы разбивается на части: внутри ПЭ и между ПЭ. Практически каждый ЛП может быть логически реализован как поток (thread). «Накладные расходы» на взаимодействие потоков обычно пренебрежимо малы по сравнению с временем работы собственно ЛП, поэтому взаимодействие объемных ЛП может быть оптимально организовано по консервативному сценарию. Естественно приписать локальное время  $h_I(T)$  каждому ЛП, а не ПЭ, как обычно принято в теории ПМДС (Fujimoto, 1990). По-прежнему эволюция профиля горизонта времен аналогична эволюции растущей поверхности. Итак, каждый ПЭ обрабатывает несколько ЛП (обозначим их число через  $k$ , причем  $k < L$ , точнее,  $L = kN_{\text{ПЭ}}$ , где  $N_{\text{ПЭ}}$  — число ПЭ), которые взаимодействуют между собой по консервативному протоколу, в то время как ПЭ могут взаимодействовать по любому другому протоколу, например консервативному или оптимистическому. В случае если поверхностные ЛП различных ПЭ взаимодействуют консервативно, эволюция горизонта времен происходит аналогично алгоритму КТНР. Однако в нашем случае эффективность использования процессорного времени существенно выше. На самом деле вероятность того, что случайно выбранный узел не находится в локальном минимуме, равна  $1 - \langle u \rangle$ . Тогда в предположении независимости случайных времен  $h_I(T)$  вероятность того, что все  $k$  узлов не находятся в локальном минимуме, равна  $(1 - \langle u \rangle)^k$  и эффективность алгоритма равна  $1 - (1 - \langle u \rangle)^k$ . Величина  $\langle u \rangle$  зависит от типа шума и составляет для пуассоновского шума 0,246, для гауссова шума — 0,258 и для равномерного распределения — 0,267. Для всех случаев эффективность нашего алгоритма будет стремиться к единице по экспоненциальному закону с увеличением  $k$  — числа ЛП, обрабатываемых каждым ПЭ.

### АЛГОРИТМ FaS

Уместно вернуться к наличию связи между консервативным подходом и уравнением Бюргерса. Тогда мы можем провести аналогию между классификацией подходов ПМДС и набором допустимых граничных условий уравнения Бюргерса. Очевидно, что консервативный случай соответствует непрерывным граничным условиям между ПЭ. Оптимистический подход соответствует свободным граничным условиям в пределах некоторого временного окна, характеризуемого интервалом времени, в течение которого мы (оптимистично) полагаем, что причинность в связях между ПЭ не нарушается. Можно реализовать и третий случай, аналогичный фиксированным граничным условиям. Именно

это граничное условие и составляет первый шаг выполнения алгоритма FaS. Он состоит в том, что в течение некоторого промежутка времени  $t_W$  обработка поверхностных ЛП не производится, их локальные времена зафиксированы. С течением глобального времени  $T$  происходит распространение точки фиксации вглубь кластера так, что через некоторое время эта точка достигнет середины кластера и эволюция остановится. Вся система оказывается замороженной. Теперь нам надо найти эффективный способ обмена сообщениями, причем необходимо сохранять принцип причинности. Одна из принципиальных возможностей состоит в перераспределении ЛП между ПЭ. Это можно пояснить на примере упорядоченной цепочки, введенной при обсуждении алгоритма КТНР. Произведем, например, сдвиг вдоль (периодической) цепочки на расстояние  $k/2$  таким образом, чтобы, например, левая часть ЛП из ПЭ <sub>$l$</sub>  стала правой частью ЛП в ПЭ <sub>$l-1$</sub> . Это составляет вторую часть алгоритма FaS — сдвиг. После чего применим ту же процедуру, что описана выше, — эволюцию с фиксированными условиями между ПЭ и консервативными условиями внутри ПЭ. Заметим, что в современной архитектуре вычислительных систем пересылка блоков памяти реализована весьма эффективно. Как правило, время обмена строками между микросхемами памяти порядка времени чтения/записи одного произвольного элемента памяти. Более того, обмен блоками памяти, как правило, происходит параллельно с работой центрального процессора. Безусловно, шаг «сдвиг» алгоритма требует точной реализации и существенно зависит от архитектуры системы. При этом следует отметить, что алгоритмы МПДС применяются для решения широкомасштабных специализированных задач и реализуются, как правило, также на специализированных вычислительных комплексах. Дополнительные особенности нашего алгоритма не могут быть существенным препятствием при реализации алгоритма FaS.

Эволюция горизонта времен в алгоритме FaS разбивается естественным образом на две составляющие. Во время выполнения шага «фиксация» точка фиксации распространяется от поверхности вглубь кластера по закону

$$z \approx \frac{k - \sqrt{k^2 - 4T}}{2}$$

и достигнет его середины за время

$$T_1 = 2 \sum_{l=1}^{k/2} l \approx \frac{k^2}{4}.$$

В это время профиль горизонта времен в каждом ПЭ будет иметь вид холмика. Разностная производная от такого профиля будет похожа на стационарный кинк (пара солитон — антисолитон) на языке уравнения Бюргерса. Иными словами, при фиксированных граничных условиях эволюция горизонта времен внутри каждого ПЭ заканчивается формированием стационарного кинка. Существенно для алгоритма, что вплоть до этого момента эффективность использования процессорного времени близка к единице. Полный горизонт

времен будет иметь вид пилы с  $L/k$  зубьями, или кинками. При этом квадратичная ширина горизонта времен меняется периодически между некоторыми минимальным и максимальным значениями. Данные значения зависят от величины  $t_w$ , которое должно выбираться из интервала  $[1, T_1]$ . По-видимому, оптимальным является значение  $t_w$  в интервале  $[1/3, 2/3]$ . Эта величина должна быть оптимизирована для конкретной реализации алгоритма.

Мы исследовали алгоритм для случая большего числа локальных связей графа ЛП, например для квадратной решетки с ближайшими соседями. В этом случае консервативный алгоритм КТНР имеет эффективность примерно  $1/8$ , что вдвое ниже, чем для цепочки. Размер временного окна для алгоритма FaS лежит в интервале  $[1, k^3/12]$ . Алгоритм FaS может быть также адаптирован для решения системы уравнений в частных производных (Novotny, Shchur, 2005).

## ОПТИМИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Алгоритмы оптимистического подхода обычно реализуются как повторяющаяся последовательность двух основных частей. В первой части система эволюционирует без взаимодействия между ПЭ, предполагая, что причинность не будет нарушена в некотором интервале глобального времени  $\Delta T$ . В пределах этого временного интервала каждый ПЭ может изменить свое состояние, т. е. эволюционировать в своем локальном времени  $h_I$ . По-прежнему мы полагаем, что локальные времена подчиняются пуассоновскому распределению. Во второй части алгоритма выполняется проверка штампов времени сообщений, полученных от других ПЭ. Если ПЭ нарушил условие причинности, он должен отойти назад до того момента времени, при котором была нарушена причинность. Считается, что времена отхода также распределены по Пуассону. Предлагается такая упрощенная модель для анализа горизонта времен оптимистического подхода: 1) инициализируется глобальное время  $T = 0$ ; 2) инициализируются локальные времена  $h_I(T = 0) = 0$ , ( $I = 1, \dots, L$ ) для  $L$ -процессорных элементов ПЭ <sub>$I$</sub> , которые расположим на кольце; 3) увеличивается глобальное время  $T$ :  $T = T + 1$  и выполняются следующие шаги: а) выбирается случайное целое  $J$  из распределения Пуассона; б) увеличивается локальное время произвольно выбранного ПЭ  $h_I(T + 1) = h_I(T) + J$ ; этот шаг повторяется  $L$  раз; в) выбирается случайное целое  $K$  из распределения Пуассона; г) изменяется локальное время произвольно выбранного ПЭ с равной вероятностью — с учетом значения локального времени левого ПЭ  $h_I(T + 1) = \min(h_I(T), h_{I-1}(T))$  или правого элемента  $h_I(T + 1) = \min(h_I(T), h_{I+1}(T))$ ; этот шаг повторяется  $LK$  раз. Для анализа удобно ввести параметр  $q = J/(J + K)$ . Оказывается, средняя скорость эволюции горизонта времен уменьшается до нуля при приближении параметра  $q$  к критическому значению  $q_C = 0,233$ . Параметр  $K$  при этом принимает критическое значение  $K_C = 2,39J$ . Практически это означает, что если при выполнении  $J$  шагов оптимистической эволюции понадобится  $K_C$  шагов для отхода назад

по времени, то система не сможет эволюционировать во времени — горизонт времен будет флуктуировать вокруг некоторого значения. В теории роста поверхности этот эффект называется переходом шероховатости поверхности (Alon et al. 1996). Именно при значениях вероятности абсорбции  $q$ , больших критического значения  $q_c$ , поверхность растет так, что среднеквадратичная ширина профиля поверхности расходится по степенному закону. При значениях же  $q$ , меньших критического, поверхность остается достаточно гладкой. В нашем случае средняя скорость горизонта времен обращается в нуль при критическом значении параметра по степенному закону с показателем  $1,74(2)$ .

### Выводы

Проанализирована эволюция горизонта времен в некоторых алгоритмах ПМДС. Обобщено понятие локального времени на случай выполнения программы на многоядерных и/или многопоточковых системах. Показано, что задача может быть сведена к анализу некоторых частных решений нелинейного уравнения Бюргерса. Сравнительный анализ двух задач позволяет провести классификацию различных подходов к ПМДС параллельно классификации граничных условий уравнения Бюргерса. Оптимистический, консервативный и FaS-подход соответствуют свободным, периодическим и фиксированным граничным условиям уравнения Бюргерса. Обнаружен фазовый переход в законе изменения средней скорости эволюции горизонта времен при оптимистическом сценарии проведения ПМДС. Аналогия с теорией роста поверхности при молекулярно-пучковой эпитаксии может быть полезна при реализации обсуждаемых алгоритмов для частных случаев проведения моделирования методом параллельных дискретных событий. Предложенные нами алгоритмы учитывают многоядерность и многопоточковость, а также другие особенности развития современных вычислительных систем.

### Литература

- Гурбатов С. Н., Малахов А. Н., Саичев А. И. Нелинейные случайные волны в средах без дисперсии. М.: Наука, 1990.
- Alon U., Evans M. R., Hinrichsen H., Mukamel D. Roughening Transition in a One-Dimensional Growth Process // Physical Rev. Letters. 1996. V. 76. P. 2746–2749.
- Fujimoto R. M. Parallel Discrete Event Simulation // Commun. ACM. 1990. V. 33. P. 31–53.
- Jefferson D. R. Virtual Time // ACM Trans. on Programming Languages and Systems (TOPLAS). 1985. V. 7. P. 404–425.
- Kardar M., Parisi G., Zhang Y.-C. Dynamic Scaling of Growing Interfaces // Physical Rev. Letters. 1986. V. 56. P. 889–892.
- Korniss G., Toroczkai Z., Novotny M. A., Rikvold P. A. From Massively Parallel Algorithms and Fluctuating Time Horizons to Nonequilibrium Surface Growth // Physical Rev. Letters. 2000. V. 84. P. 1351–1354.

*Novotny M. A., Shchur L. N.* Virtual Times for Parallel Computations of Partial Differential Equations // The Sixth Mississippi State — UAB Conf. on Differential Equations & Computational Simulations. Starkville, Mississippi State, USA. 2005.

*Shchur L. N., Novotny M. A.* Evolution of time horizons in parallel and grid simulations // Physical Rev. E. 2004. V. 70. Art. 026703.

**EVOLUTION OF TIME HORIZON  
IN PARALLEL DISCRETE EVENT SIMULATIONS**

**L. N. Shchur<sup>1, 2, 3, 4</sup>, M. A. Novotny<sup>4</sup>**

<sup>1</sup> *Landay Institute for Thejretical Physics*  
<sub>2</sub>

<sup>3</sup> *Moscow Institute of Physics and Technology (State University)*

<sup>4</sup> *Department of Physics and Astronomy and HPC Center for Computational Sciences,  
Mississippi State University*

Evolution of local time horizon (LTH) in Parallel Discrete Event Simulations (PDES) is discussed. Classification of possible PDES algorithms is proposed and it is based on the analogy of LTH evolution with evolution of solutions of Kardar-Parisi-Zhang equation. Algorithm FaS (Freeze-and-Shift) proposed by authors and is discussed. New implementation of optimistic algorithm is described. Analogy of LHT evolution and evolution of the profile of the surface under the molecular beam epitaxial growth is also discussed. Work supported by grants from NSF and from RFBR 08-07-00328 и 07-07-12053.

## ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ АВТОМОРФИЗМЫ ТОРА И ГЕНЕРАТОРЫ ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫХ ЧИСЕЛ. РЕАЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ КОМАНД SSE

Л. Ю. Бараш, Л. Н. Щур

*Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук  
E-mail: barash@itp.ac.ru*

Предложен метод построения генераторов псевдослучайных чисел высокого качества, основанный на моделировании ансамбля динамических систем. Существенными составляющими метода являются использование ансамбля гиперболических автоморфизмов единичного двумерного тора (преобразований Синая – Арнольда или «преобразований кошки») и использование скрытых переменных. Проведен анализ генератора псевдослучайных чисел на основе результатов теории Персиваля и Вивальди в обобщенном нами виде. Для генераторов предсказаны аналитически свойства периода и другие свойства, которые позволяют рекомендовать их к практическому применению. Теория была численно проверена. На основе метода построены эффективные практические реализации генератора, испытанные при помощи наборов статистических тестов, в ходе которых показано, что статистические свойства наших генераторов не хуже свойств лучших из генераторов, разработанных другими авторами. Показано, что использование системы команд SSE для реализации алгоритма позволяет существенно ускорить генерацию случайных чисел.

### Введение

Методы Монте-Карло и молекулярной динамики — важные методы исследования явлений в разнообразных областях физики, в том числе в квантовой физике (*Beach* и др., 2004), статистической физике (*Landau, Binder*, 2000), ядерной физике (*Pieper, Wiring*, 2001), квантовой химии (*Luchow*, 2000), в науках о материалах (*Bizzarri*, 2004). Эти методы получили широкое распространение с появлением мощных компьютеров. Для их применения на практике необходима эффективная и машино-независимая генерация равномерно распределенных случайных чисел. Для этой цели широко используются генераторы случайных чисел RNG (Random Number Generators). RNG выдает последовательность чисел, которая ведет себя таким же образом, как независимые реализации случайной величины, имеющей равномерное распределение. Эта последовательность обладает важными свойствами случайной последовательности и при этом произведена детерминистским способом, т. е. является псевдослучайной. В течение последних десятилетий произошел большой прорыв в изучении алгоритмов для генераторов случайных чисел (*Кнут*, 2000).

Генераторы случайных чисел и их реализации в библиотеках подпрограмм должны удовлетворять ряду существенных требований.

- *Статистическая устойчивость.* Значения на выходе идеального RNG должны быть равномерно распределены, корреляции — отсутствовать. Другими

словами, все подпоследовательности любой фиксированной длины должны иметь одну и ту же вероятность появления в последовательности, выдаваемой генератором. С практической точки зрения последовательность псевдослучайных чисел проходит набор статистических тестов на равномерное распределение и независимость.

- *Непредсказуемость.* В основном это свойство важно для криптографических алгоритмов. Требование состоит в невозможности надежно предсказать значение  $a_{n+1}$  по  $(a_0, \dots, a_n)$  при помощи какого-либо полиномиального алгоритма. Здесь  $a_n$  — значение на выходе генератора.

- *Длинный период.* Период генератора должен быть достаточно большим, чтобы не быть исчерпанным за месяцы компьютерного времени. Численный эксперимент на суперкомпьютере может задействовать  $10^9$  случайных чисел в секунду в течение многих часов (или месяцев в случае, например, вычислений КХД), поэтому  $10^{13}$ – $10^{16}$  случайных чисел могут вносить вклад в результат эксперимента. Для большинства генераторов использование небольшой части периода  $T$  предпочтительнее с точки зрения статистических свойств, чем использование периода целиком. Распространенным правилом является использование не более  $\sqrt{T}$  чисел.

- *Эффективность.* Должна существовать эффективная реализация RNG с точки зрения скорости и использования оперативной памяти.

- *Наличие теории.* Свойства генератора, такие как длина периода, часто могут быть найдены точно с помощью аналитических методов. Для RNG чрезвычайно желательно понимать поведение генератора, а не рассчитывать только на эмпирические тесты. По этой причине генератор должен быть основательно проанализирован теоретически и, кроме того, пройти статистические тесты.

- *Воспроизводимость.* Часто полезно повторить ту же самую последовательность псевдослучайных чисел, что возникла в предыдущем запуске приложения. Большинство генераторов псевдослучайных чисел может выдавать воспроизводимые последовательности в отличие от последовательностей, генерируемых физическими устройствами. Например, случайный бит можно получить, приготовив кубит  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  и спроецировав его на  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , однако последовательность таких случайных битов не будет воспроизводима.

- *Переносимость* — это возможность генерировать одну и ту же последовательность псевдослучайных чисел на разных платформах.

- *Пропуск кусков.* Для любого большого  $r$  должна быть возможность быстрого вычисления значения  $s_{n+r}$ , напрямую из  $s_n$ , без генерации промежуточных состояний. Здесь  $s_n$  — состояние генератора.

- *Правильная инициализация.* Важно, чтобы короткие последовательности, выдаваемые RNG, не имели корреляций; этого не так просто добиться для генераторов, состояния которых обладают большим объемом информации.

В настоящее время наиболее широко используемые RNG могут быть поделены на два основных класса.

- Линейно-конгруэнтные генераторы (LCG) — наиболее известный и все еще наиболее широко распространенный в настоящее время класс генераторов. Простым примером реализации LCG является классический генератор **rand** в системе UNIX, который описывается выражением  $x_n = (1103515245x_{n-1} + 12345) \pmod{2^{31}}$ . Существует два основных недостатка линейно-конгруэнтных генераторов. Во-первых, максимальная длина периода мультипликативного LCG с модулем  $2^{32}$  может быть исчерпана за несколько секунд на современной рабочей станции. Во-вторых, LCG не следует использовать в приложениях, имеющих дело со случайными векторами в многомерном пространстве, поскольку соответствующие точки, получаемые из псевдослучайной последовательности на выходе LCG, будут лежать в пространстве меньшей размерности (Кнут, 2000; Coveyou, McPherson, 1968).

- Генераторы, основанные на сдвиговом регистре (GFSR), широко используются во многих областях вычислительной физики. Эти RNG быстрые и обладают гигантским периодом при условии правильного выбора примитивных триномов, лежащих в основе таких генераторов (Golomb, 1967). Поэтому они особенно хорошо подходят для приложений, требующих большого количества случайных чисел. Однако в генераторах этого класса были обнаружены корреляции, которые могут привести к систематическим ошибкам в вычислениях Монте-Карло (Ferrenberg et al., 1992; Vattulainen et al., 1994; Schmid, Wilding, 1995; Shchur, Bloete, 1997; Grassberger, 1993).

Современные модификации и обобщения методов LCG и GFSR имеют намного лучшие статистические свойства. В качестве примеров можно привести генератор Mersenne Twister (Matsumoto, Tishimura, 1998), комбинированные LCG-генераторы (L'Ecuyer, 1999), комбинированные Tausworthe-генераторы (L'Ecuyer, 1996, 1999). Следует, однако, иметь в виду, что многие используемые в настоящее время генераторы сравнительно легко поддаются расшифровке. Возможно, наиболее криптографически стойкий из известных сегодня генераторов — BBS-генератор (Blum et al., 1986), однако он имеет меньшее быстродействие для практических нужд: скорость его работы быстро убывает при увеличении размера  $s$  генератора, который должен быть достаточно большим для криптографической стойкости (рассмотрение криптографически стойких RNG выходит за рамки данной работы).

Мы рассматриваем задачу об использовании простых нелинейных динамических систем для построения RNG. Отметим, что большинство динамических систем не подходят для этой цели. К примеру, двоичный сдвиг Бернулли  $x_{n+1} = 2x_n \pmod{1}$ , являющийся основным элементом в «преобразовании пекаря», является хаотическим отображением. Он выдает последовательность случайных чисел, если начальное значение будет случайным иррациональным числом. Однако такая схема бесполезна для RNG, поскольку в реальных вычислениях числа имеют конечное количество бит, и на каждом шагу число оставшихся бит будет уменьшаться.

Другим примером служит квадратичное (логистическое) отображение (Лихтенберг, Либерман, 1984; Шустер, 1988), которое не годится для RNG по нескольким причинам. Во-первых, вычисления с вещественными числами постоянной точности приведут к существенным ошибкам на длинных орбитах. Далее, последовательность чисел на выходе логистического отображения не имеет равномерного распределения (Шустер, 1988). Кроме того, логистическое отображение представляет собой хаотическую динамическую систему только для изолированных значений параметра. Даже малые отклонения от этих изолированных значений приведут к разбиению фазового пространства на под-области, т. е. орбита точки не будет заметать все фазовое пространство.

Следующий класс нелинейных динамических систем — диффеоморфизмы Аносова единичного двумерного тора, которые активно исследовались в контексте эргодической теории. Системы Аносова обладают широким набором стохастических свойств: эргодичность, перемешивание, чувствительность к начальным условиям (которая следует из положительности показателя Ляпунова), локальная расходимость близких траекторий (которая следует из положительности энтропии Колмогорова – Синая). Эти свойства напоминают определенные свойства случайности. Каждый диффеоморфизм Аносова для тора топологически сопряжен с гиперболическим автоморфизмом, который является полностью хаотической динамической системой. Гиперболический автоморфизм определяется матрицей  $2 \times 2$  с целыми числами, единичным детерминантом и вещественными собственными значениями. Часто гиперболические автоморфизмы единичного двумерного тора называют «отображениями кошки», поскольку хаотические свойства этих отображений в литературе традиционно иллюстрируют, рисуя область, в которую отображается изображение кошки (Arnold, Avez, 1968), также поскольку английское слово CAT можно считать сокращением фразы „Continuous Automorphism of the Torus“, т. е. «непрерывное отображение тора». Отметим, что многократное действие преобразования кошки отвечает динамике гамильтоновой системы в фазовом пространстве. В самом деле, действие отображения (1) при  $k = \text{Tr}(M) > 2$

на вектор  $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$  соответствует движению, определяемому гамильтонианом

$$H(p, q) = \frac{\text{arcsch}\left(\frac{\sqrt{k^2 - 4}}{2}\right)}{\sqrt{k^2 - 4}} \left( m_{12}p^2 - m_{21}q^2 + (m_{11} - m_{22})pq \right), \text{ где } p \text{ и } q \text{ берется по}$$

модулю 1 при каждом наблюдении, проводимом в целочисленные моменты времени. «Преобразование кошки» сохраняет площадь, в силу того что у него единичный детерминант. Это важное свойство имеется у всех гамильтоновых систем, поскольку теорема Лиувилля гарантирует сохранение фазового объема во временной эволюции системы.

Данная работа посвящена изложению теории и методики построения RNG, которые основаны на моделировании ансамбля «преобразований кошки», и определяют важные свойства таких генераторов (см. также Barash,

*Shchur*, 2006). Основной идеей является применение «преобразования кошки» к дискретному набору точек  $g \times g$  так, чтобы точки лежали на различных периодических траекториях.

В данном методе: 1) используется ансамбль эргодических динамических систем вместо единичной системы; 2) имеются скрытые переменные, т. е. только небольшая часть генерируемой информации остается на выходе генератора, это помогает избавиться от корреляций и усложняет расшифровку; 3) период генератора может быть настолько большим, насколько это требуется.

В разд. 1 представлен RNG, основанный на этой идее. В разд. 2 мы исследуем свойства генератора. В частности, предложен метод вычисления периода генератора для произвольных параметров отображения и решетки. Этот метод основан на работе Персиваля и Вивальди (*Percival, Vivaldi*, 1987), в которой показано, как задача изучения периодических орбит «преобразований кошки» может быть сведена к проблемам арифметики алгебраических чисел (фактически к вычислениям в кольцах квадратичных чисел (*Cohn*, 1980; *Chapman*, 2002)). Как показано в разд. 2, типичная длина периода генератора равна  $T_m = 3 \times 2^{m-3}$  для решетки  $2^m \times 2^m$ . В разд. 4 показано, что последовательность на выходе RNG проходит набор стандартных статистических тестов и имеет хорошие статистические свойства. В разд. 4 рассмотрены корреляции в единичном «преобразовании кошки» при помощи критерия направленного случайного блуждания и предложен способ уменьшения этих корреляций. В разд. 5 описаны свойства эффективных практических реализаций RNG и продемонстрирована эффективность применения SSE-команд для ускорения вычислений.

## 1. ГЕНЕРАТОР

Рассмотрим гиперболические автоморфизмы единичного двумерного тора (квадрата  $(0,1] \times (0,1]$  с отождествленными противоположными сторонами). Действие автоморфизма основано на действии матрицы

$$m = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \in SL_2(\mathbb{Z}). \quad (1)$$

Элементы матрицы  $M$  — целые числа,  $\det M = 1$ , собственные числа матрицы  $M$  равны  $\lambda = (k \pm \sqrt{k^2 - 4})/2$ , где  $k = \text{Tr}(M)$  обозначает след матрицы  $M$ . Собственные значения должны быть вещественными, потому что комплексные значения  $\lambda$  приводят к неэргодическому динамическому процессу. Если след  $k$  удовлетворяет условию гиперболичности  $|k| > 2$ , то  $\lambda$  вещественно и матрица  $M$  определяет диффеоморфизм Аносова двумерного тора.

«Отображение кошки»  $R$  реализуется в два этапа. На первом этапе отображение  $M$  действует на вектор  $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ , на втором этапе берется дробная часть обеих координат  $p$  и  $q$  в фазовом пространстве.

Легко показать, что все периодические орбиты гиперболического автоморфизма тора состоят из точек с рациональными координатами (Arnold, Avez, 1968; Percival, Vivaldi, 1987; Keating, 1991). Поэтому естественно рассмотреть множество точек с координатами, имеющими один и тот же знаменатель  $g$ . Решетка из таких точек инвариантна по отношению к действию «преобразования кошки». Будем конструировать генераторы с  $g = 2^m$ , где  $m$  — целое положительное число, и генераторы с  $g = p = 2^m - 1$ , где  $m$  — мерсеновская экспонента, т. е.  $p = 2^m - 1$  является простым числом.

Понятие генератора случайных чисел может быть формализовано следующим образом: генератор — это структура  $g = (S, s_0, T, U, G)$ , где  $S$  — конечное множество состояний;  $s_0 \in S$  — начальное состояние; преобразование  $T: S \rightarrow S$  — функция перехода;  $U$  — конечное множество выходных символов и  $G: S \rightarrow U$  — выходная функция генератора (L'Ecuyer, 1994). Таким образом, состоянием генератора изначально является  $s_0$ , и генератор меняет свое состояние на каждом шагу, вычисляя  $s_n = T(s_{n-1})$ ,  $u_n = G(s_n)$  на шаге  $n$ . Значения  $u_n$  на выходе генератора называются *наблюдаемыми значениями* или просто *псевдослучайными числами* на выходе генератора. Выходная функция  $G$  может использовать только малую часть информации состояния генератора для вычисления случайного числа. В этом случае говорят о существовании *скрытых переменных*, т. е. некоторая часть информации о состоянии «скрыта» и не может быть восстановлена по последовательности наблюдаемых значений.

Мы рассмотрим генератор с  $S = L^s$ , где  $L = \{0, 1, \dots, g - 1\} \times \{0, 1, \dots, g - 1\}$  — решетка на торе и  $s$  — положительное целое число. Другими словами, состояние генератора состоит из  $s$  точек, лежащих на решетке  $g \times g$  на торе. В частности,

начальное состояние состоит из точек  $\begin{pmatrix} x_i^{(0)} \\ y_i^{(0)} \end{pmatrix}$ , где  $x_i^{(0)}, y_i^{(0)} \in \{0, 1, \dots, g - 1\}$  и  $i = 0, 1, \dots, s - 1$ . Отметим, что это точки целочисленной решетки, т. е.  $x_i^{(0)}$  и  $y_i^{(0)}$  — положительные целые числа. Начальными точками на единичном двумерном торе  $(0, 1] \times (0, 1]$  являются

$$\begin{pmatrix} x_i^{(0)} / g \\ y_i^{(0)} / g \end{pmatrix}, \quad i = 0, 1, \dots, s - 1. \quad (2)$$

Функция перехода генератора определяется действием «преобразования кошки»  $R$ , т. е. на каждом шаге генератора указанные  $s$  точек преобразуются при помощи «преобразования кошки»  $R$ :

$$\begin{pmatrix} x_i^{(n)} / g \\ y_i^{(n)} / g \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} x_i^{(n-1)} / g \\ y_i^{(n-1)} / g \end{pmatrix} (\text{mod } 1), \quad i = 0, 1, \dots, s - 1. \quad (3)$$

Здесь операция  $\text{mod } 1$  означает взятие дробной части вещественного числа. По-другому действие «преобразования кошки» можно записать следующим образом:

$$\begin{pmatrix} x_i^{(n)} \\ y_i^{(n)} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} x_i^{(n-1)} \\ y_i^{(n-1)} \end{pmatrix} \pmod{g}, \quad i = 0, 1, \dots, s-1. \quad (4)$$

Осталось определить выходную функцию генератора  $G: L^s \rightarrow \{0, 1, \dots, 2^s - 1\}$ , при помощи которой вычисляется каждый элемент последовательности  $\{a^{(n)}\}$  на выходе генератора. Пусть  $a_i^{(n)}$  обозначает 0 или 1 в зависимости от того,  $x_i^{(n)} < g/2$  или  $x_i^{(n)} \geq g/2$ , т. е.  $a_i^{(n)} = \lfloor 2x_i^{(n)} / g \rfloor$ . Тогда искомое число на выходе генератора будет следующим:  $a^{(n)} = \sum_{i=0}^{s-1} a_i^{(n)} \cdot 2^i$ . Другими словами,  $a^{(n)}$  — это  $s$ -битовое целое число, которое состоит из первых битов чисел  $x_0^{(n)}, x_1^{(n)}, \dots, x_{s-1}^{(n)}$ .

Мы видим, что построенный таким образом RNG содержит много скрытой информации. Например,  $s(m-1)$  битов вектора  $\begin{pmatrix} x_i^{(n)} \\ y_i^{(n)} \end{pmatrix}$  являются скрытыми переменными для  $g = 2^m$ ; это именно те биты, которые не участвуют в построении выходного значения  $a^{(n)}$ .

Таким образом, основными ингредиентами предложенного метода являются применение хаотических свойств динамики и рассмотрение ансамбля систем с частичным скрыванием информации. Применение «преобразования кошки» приводит к свойствам эргодичности, стохастичности, гиперболичности, которые необходимы для генераторов случайных чисел высокого качества. Огромное число точек решетки делает непрерывную систему хорошим первым приближением к RNG и приводит к важности хаотических свойств. Скрытые переменные уменьшают корреляции и существенно усложняют задачу расшифровки RNG.

## 2. СВОЙСТВА ОРБИТ «ПРЕОБРАЗОВАНИЯ КОШКИ», ВЫЧИСЛЕНИЕ ПЕРИОДА ГЕНЕРАТОРА И ПРАВИЛЬНАЯ ИНИЦИАЛИЗАЦИЯ ГЕНЕРАТОРА

Чтобы вычислить период RNG, сначала необходимо получить период траекторий единичного «преобразования кошки» на решетке  $g \times g$  тора.

Действие автоморфизма единичного двумерного тора определяется матрицей (1). Элементы матрицы  $M$  — целые числа, ее детерминант равен единице. Кроме того, собственные числа матрицы  $M$ , равные  $\lambda = (k \pm \sqrt{k^2 - 4})/2$ , где  $k = \text{Tr}(M)$ , должны быть вещественны (известно, что для комплексных  $\lambda$  отображение тора  $M$  не является даже эргодичным). Поэтому дополнительное условие гиперболичности отображения заключается в том, что  $|k| > 2$ .

В работе (Percival, Vivaldi, 1987) было отмечено, что из всех матриц со следом  $k$  можно выделить одну матрицу, такую, для которой связь между свойствами орбит автоморфизма тора и арифметикой квадратичных целых чисел наиболее прозрачна. А именно элементы матрицы (1) выбираются так, чтобы

$$\begin{cases} \lambda = m_{11} + \tau m_{21}, \\ \lambda \tau = m_{12} + \tau m_{22}. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь  $\tau$  — базисный элемент кольца квадратичных целых  $R_D = \{a + b\tau : a, b \in \mathbb{Z}\}$ , в котором лежит  $\lambda$ . Это означает, что  $k^2 - 4 = n^2 D$ , где целое число  $D$  свободно от квадратов и  $\tau = \sqrt{D}$  для  $D \not\equiv 1 \pmod{4}$ ,  $\tau = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{D})$  для  $D \equiv 1 \pmod{4}$ .

Легко проверить, что если элементы матрицы выбрать по правилу (5), то для любых целых  $x, y, x', y'$  равенство  $x' + y'\tau = \lambda(x + y\tau)$  равносильно равенству  $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ . В самом деле,  $\lambda(x + y\tau) = \lambda x + (\lambda\tau)y = (m_{11}x + m_{12}y) + (m_{21}x + m_{22}y)\tau = x' + y'\tau$ . Таким образом, действие автоморфизма  $M$  соответствует умножению на квадратичное число  $\lambda$ , действие же автоморфизма  $M^{-1}$  соответствует умножению на  $\lambda^{-1}$ , поэтому для вычисления длины орбиты неважно, какое из двух собственных чисел  $\lambda = (k \pm \sqrt{k^2 - 4})/2$  выбирать. Для определенности можно всегда выбирать большее из них.

Следовательно, периодом орбиты, содержащей точку  $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$  целочисленной решетки  $L$ , является наименьшее целое  $T$ , такое, что  $\lambda^T z \equiv z \pmod{\langle g \rangle}$ . Здесь  $z = x + y\tau$ ,  $\langle g \rangle = \{ag + b\tau : a, b \in \mathbb{Z}\}$  — принципиальный квадратичный идеал, порожденный числом  $g$ .

Пусть  $T_m$  — период свободных орбит для  $g = 2^m$ ;  $T'_m$  — период тех идеальных орбит для  $g = 2^m$ , которые не лежат на подрешетке  $g/2 \times g/2$ . Напомним, что идеальная орбита — это орбита, лежащая в подрешетке, соответствующей некоторому идеалу, который делит  $\langle g \rangle$ , но отличен от  $\langle 1 \rangle$ . Свободная орбита — это любая другая орбита.

Чтобы определить структуру периодических орбит на решетке  $2^m \times 2^m$ , мы доказали следующие утверждения, которые обобщают результаты работы (Percival, Vivaldi, 1987):

1. Для всех  $m$  либо  $T_{m+1} = 2T_m$ , либо  $T_{m+1} = T_m$ .
2. Для всех  $m$  либо  $T'_m = T_m$ , либо  $T'_m = T_{m-1}$ .
3. Для всех  $m \geq 3$   $T_m \neq T_{m-1} \Rightarrow T_{m+1} \neq T_m$ .
4. Если  $m \geq 4$ ,  $T_m \neq T_{m-1}$  и  $T'_m = T_m/a$ , где  $a \in \{1, 2\}$ , то  $T'_{m+1} = T_{m+1}/a$ .

Мы нашли число свободных орбит в инертном случае.

Всего на решетке  $2^{2m} - 1$  точек. Идеальная орбита содержит  $2^{2m-2} - 1$  точек.

Следовательно, всего имеется  $(2^{2m} - 2^{2m-2})/T_m = 3 \cdot 2^{2m-2}/T_m$  свободных орбит.

Мы получили, что в характерном инертном случае  $T_m = 3 \cdot 2^{m-2}$ , и фазовое пространство делится на области следующим образом:

- $3/4$  фазового пространства заматаются  $2^m$  траекториями периода  $T_m$ ;

- 3/16 фазового пространства замечаются  $2^{m-1}$  траекториями периода  $T_{m-1} = T_m/2$ ;
- 3/64 фазового пространства замечаются  $2^{m-2}$  траекториями периода  $T_{m-2} = T_m/4$  и т. д.

Таким образом, с одной стороны, «преобразования кошки» имеют гигантские периоды, с другой стороны, число точек на каждой орбите достаточно велико. Оба эти свойства важны для нашего метода конструирования RNG.

Мы показали, что при правильной инициализации генератора период выходной последовательности генератора  $\{a^{(n)}\}$  в точности совпадает с периодом  $T_m$  свободных орбит «преобразования кошки».

Правильная инициализация генератора с  $g = 2^m$  заключается в проверке двух утверждений:

1. Нормы всех начальных точек должны различаться по модулю 256. В частности, это гарантирует, что начальные точки  $\begin{pmatrix} x_i^{(0)} \\ y_i^{(0)} \end{pmatrix}$ ,  $i = 0, 1, \dots, s-1$  попадают на различные орбиты «преобразования кошки» и что ни одна из симметрий не отождествит пару из этих орбит между собой.

2. По крайней мере одна из точек должна принадлежать свободной орбите, т. е. хотя бы одна из ее координат  $x$  и  $y$  должна быть нечетным числом. Это гарантирует, что длина периода генератора будет не меньше, чем  $T_m$ .

Здесь нормой точки называется норма соответствующего ему квадратичного числа  $N(a + b\sqrt{D}) = (a + b\sqrt{D})(a - b\sqrt{D}) = a^2 - b^2D$ . Можно показать, что  $N\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \equiv N\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \pmod{g}$ , т. е. норма по модулю  $g$  является характеристикой всей орбиты и не меняется вдоль траектории.

### 3. СТАТИСТИЧЕСКИЕ ТЕСТЫ

В настоящее время доступны сотни статистических тестов в виде программных пакетов, например широко используемые пакеты DieHard (*Marsaglia*, 1995), NIST и TestU01 (*L'Ecuyer, Simard*, 2002). Все эти пакеты включают в себя классические тесты, предложенные Кнудом (*Кнут*, 2000), наряду со многими другими статистическими тестами.

В табл. 1 представлены краткие результаты для батарей тестов SmallCrush, PseudoDiehard, Crush и Bigcrush из (*L'Ecuyer, Simard*, 2002). Эти батареи тестов содержат 14, 126, 93 и 65 тестов соответственно. Детальные параметры генераторов GS, GR, GSI, GRI, GM19, GM31 представлены ниже.

Для сравнения были также протестированы стандартные генераторы RAND, RAND48 и RANDOM (эти генераторы являются 32-битным LCG, 64-битным LCG и комбинацией пяти аддитивных генераторов соответственно, они реализованы в стандартной библиотеке stdlib и представлены в документации к stdlib) и современные генераторы MT19937 (*Matsumoto, Tishimura*, 1998), LFSR113 (*L'Ecuyer*, 1996), MRG32k3a (*L'Ecuyer*, 1999).

**Таблица 1.** Число непройденных тестов для батарей статистических тестов SmallCrush, Crush, Bigcrush (*L'Ecuyer, Simard, 2002*) и DieHard (*Marsaglia, 1995*). Здесь  $k = \text{Tr } M$ ,  $q = \det M$  — параметры RNG. Для каждого теста представлены три числа статистических тестов: с p-value вне интервала  $[10^{-2}, 1 - 10^{-2}]$ , с p-value вне интервала  $[10^{-5}, 1 - 10^{-5}]$  и с p-value вне интервала  $[10^{-10}, 1 - 10^{-10}]$

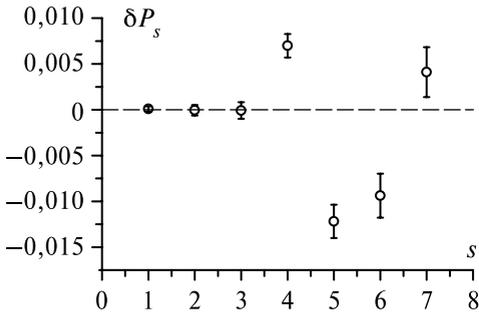
Генератор	$k$	$q$	SmallCrush	DieHard	Crush	Bigcrush
GS	3	1	0, 0, 0	44, 29, 29	20, 16, 14	22, 20, 19
GR	3	1	0, 0, 0	5, 0, 0	5, 1, 0	15, 10, 7
GSI	11	1	0, 0, 0	1, 0, 0	10, 1, 0	13, 7, 6
GRI	11	1	1, 0, 0	6, 0, 0	5, 0, 0	13, 6, 5
GM19	15	28	0, 0, 0	2, 0, 0	2, 0, 0	3, 0, 0
GM31	7	11	0, 0, 0	2, 0, 0	3, 0, 0	1, 0, 0
RAND	—	—	13, 13, 12	88, 84, 82	102, 100, 100	85, 83, 79
RAND48	—	—	5, 5, 3	27, 23, 22	22, 20, 20	27, 23, 22
RANDOM	—	—	3, 2, 2	17, 15, 15	13, 11, 10	21, 15, 14
MRG32k3a	—	—	1, 0, 0	3, 0, 0	4, 0, 0	2, 0, 0
LFSR113	—	—	0, 0, 0	3, 0, 0	8, 6, 6	8, 3, 3
MT19937	—	—	0, 0, 0	2, 0, 0	1, 0, 0	4, 0, 0

Таким образом, лучшие генераторы, основанные на «преобразовании кошки», могут успешно конкурировать с другими высокопроизводительными современными генераторами. В частности, к использованию нами рекомендованы эффективные реализации генераторов GRI и GM31, снабженные правильной инициализацией.

#### 4. КРИТЕРИЙ НАПРАВЛЕННОГО СЛУЧАЙНОГО БЛУЖДЕНИЯ

Тест на случайное блуждание оказывается одним из наиболее мощных и чувствительных на наличие корреляций в генераторах случайных чисел. В частности, тест с использованием идеи случайного блуждания был одним из выявивших корреляции в генераторах случайных чисел типа «сдвиговый регистр» (*Vattulainen et al., 1994*). Другой тест на случайное блуждание позволил объяснить природу этих корреляций (*Shchur et al., 1997*). Некоторые тесты на случайное блуждание достаточно просты для теоретического анализа и позволяют достичь ясной картины механизма корреляций в генераторах случайных чисел.

Существует несколько вариаций теста на случайное блуждание, в различном количестве измерений (*Binder, Heerman, 1992*). Рассмотрим одномерную модель направленного случайного блуждания (*Shchur et al., 1997*): однонаправленное блуждание начинается в некотором узле одномерной решетки и при дискретных значениях времени  $i$  или происходит шаг длины 1 с вероятностью  $\mu$ , или блуждание останавливается с вероятностью  $1 - \mu$ . В последнем



**Рис. 1.** Отклонения  $\delta P_s$  вероятности блуждания длиной  $s$  от точного значения в зависимости от длины блуждания  $s$ . Изображены средние значения и дисперсии  $\delta P_s$  для 100 численных  $\chi^2$ -проверок

случае начинается новое блуждание. Вероятность блуждания длиной  $n$  равна  $P(n) = \mu^{n-1}(1-\mu)$ , а средняя длина блуждания равна  $\langle n \rangle = 1/(1-\mu)$ . Отметим, что эта модель представляет

собой эффективно кластерный метод Вольфа для одномерной модели Изинга (Shchur et al., 1997). Это можно увидеть из того, что средний размер кластера в методе Вольфа равен средней длине блуждания при  $\mu = \text{th}(J/k_B T)$ , где  $J$  — константа связи спинов.

Детальные результаты теста на случайное блуждание представлены на рис. 1. Проведено 100  $\chi^2$ -проверок, каждая из которых включала в себя  $n = 10^7$  случайных блужданий с  $\mu = 1/2$ . Таким образом, использовался лишь первый

бит генератора с  $m = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$ . После каждой  $\chi^2$ -проверки подсчитывалось значение

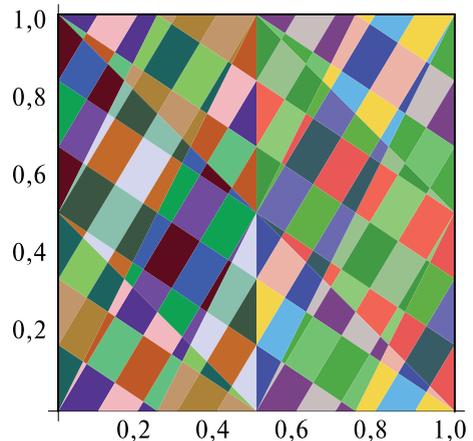
$\delta P_s = (Y_s - np_s)/(np_s)$  для всех  $s \leq 7$ . Здесь  $s$  — длина блуждания;  $p_s$  — теоретическая вероятность блуждания длины  $s$  в предположении, что случайные числа не имеют корреляций;  $Y_s$  — число блужданий длины  $s$ . Заметим, что корреляции можно обнаружить, только лишь собрав статистику по достаточно большому числу случайных блужданий. Например, для  $n = 10^5$  корреляции обнаружены не были.

Таким образом, тест на случайное блуждание выявляет существенные корреляции. На рис. 1 видно, что на выходе генератора псевдослучайных чисел некоторые последовательности из 5 бит появляются с частотой, отличной от  $1/32$ , т. е. не все последовательности из 5 бит равноправны.

На рис. 2 область каждого из восьми цветов представляет зону на торе, которую может занимать третья точка, генерируемая «преобразованием кошки»

**Рис. 2.** Области на торе и трехбитовые последовательности, генерируемые «преобразованием кошки» с матрицей

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$



с матрицей  $M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ , если последовательность трех первых битов зафиксирована (каждой трехбитовой последовательности соответствует определенный цвет). Площади, занимаемые областью каждого из восьми цветов, могут быть рассчитаны аналитически, и они оказываются равными. Следовательно, все трехбитовые последовательности равновероятны.

Аналогичным образом могут быть рассчитаны вероятности четырехбитовых и пятибитовых последовательностей. Мы доказали аналитически следующее.

1. Все подпоследовательности длин 3, 2, 1 соответственно имеют одинаковую вероятность  $1/8, 1/4, 1/2$ .

2. Если след  $k$  отображения является нечетным числом, то все подпоследовательности длины 4 имеют одну и ту же вероятность  $P_0 = 1/16$ .

3. Если же след  $k$  отображения является четным числом, то вероятность подпоследовательности 0000 зависит только от следа  $k$  матрицы и равна  $P = P_0 k^2 / (k^2 - 1)$ , где  $P_0 = 1/16$ . Вероятность подпоследовательности 0000 автоматически дает вероятности всех остальных подпоследовательностей длины 4.

4. Можно также высказать гипотезу, что для нечетного следа отображения вероятность подпоследовательности 00000 длины 5 равна  $P = P_0 (1 + 1/(3k^2 - 6))$ , где  $P_0 = 1/32$  (табл. 2).

**Таблица 2.** Вероятности подпоследовательностей для различных «преобразований кошки»

$k$	$P(0000)/P_0$	$k$	$P(0000)/P_0$	$k$	$P(0000)/P_0$
4	16/15	30	900/899	3	22/21
6	36/35	32	1024/1023	5	70/69
8	64/63	34	1156/1155	7	142/141
10	100/99	36	1296/1295	9	238/237
12	144/143	38	1444/1443	11	358/357
14	196/195	40	1600/1599	13	502/501
16	256/255	42	1764/1763	15	670/669
18	324/323	44	1936/1935	17	862/861
20	400/399	46	2116/2115	19	1078/1077
22	484/483	48	2304/2303	21	1318/1317
24	576/575	50	2500/2499	23	1582/1581
26	676/675	52	2704/2703	25	1870/1869
28	784/783	54	2916/2915	27	2182/2181

Таким образом, вероятности ведут себя как  $P/P_0 = 1 + Bk^{-2}$  для больших  $k$ , где  $P_0 = 2^{-n}$  для подпоследовательностей длин  $n = 4, 5$ . Здесь  $B = 1$  для четных  $k$  и  $n = 4$ ;  $B = 1/3$  — для нечетных  $k$  и  $n = 5$ .

Итак, отклонения, найденные при помощи теста на случайное блуждание, стремятся к нулю при увеличении следа  $k$ .

### 5. СКОРОСТЬ И ПАРАМЕТРЫ RNG. РЕАЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ КОМАНД SSE

Параметры и характеристики генераторов представлены в табл. 3. Здесь CPU-time означает время в секундах, которое требуется для компьютера PC Pentium 4 с частотой 3 ГГц, чтобы сгенерировать  $10^8$  случайных чисел. Этот параметр характеризует скорость генератора. Генераторы можно использовать только для приложений, использующих не более  $T$  случайных чисел, где  $T$  — период генератора.

Таблица 3. Скорость и другие параметры для RNG

Генератор	$g$	$s$	$k$	$Q$	Вращение	SSE2	Период	CPU-time
GS	$2^{32}$	32	3	1	—	—	$3,2 \cdot 10^9$	55,4
GS-SSE	$2^{32}$	32	3	1	—	+	$3,2 \cdot 10^9$	2,49
GR-SSE	$2^{32}$	32	3	1	+	+	$3,2 \cdot 10^9$	2,79
GSI-SSE	$2^{32}$	32	11	1	—	+	$3,2 \cdot 10^9$	3,66
GRI	$2^{32}$	32	11	1	+	—	$3,2 \cdot 10^9$	78,2
GRI-SSE	$2^{32}$	32	11	1	+	+	$3,2 \cdot 10^9$	4,03
GM19	$2^{19} - 1$	32	6	3	+	—	$2,7 \cdot 10^{11}$	120,5
GM19-SSE	$2^{19} - 1$	32	6	3	+	+	$2,7 \cdot 10^{11}$	6,11
GM31-SSE	$2^{31} - 1$	32	7	11	+	+	$4,6 \cdot 10^{18}$	8,86
RAND	—	—	—	—	—	—	$2,1 \cdot 10^9$	2,48
RAND48	—	—	—	—	—	—	$2,8 \cdot 10^{14}$	4,64
RANDOM	—	—	—	—	—	—	$3,4 \cdot 10^{10}$	1,88
MT19937	—	—	—	—	—	—	$4,3 \cdot 10^{6001}$	2,45
MRG32k3a	—	—	—	—	—	—	$3,1 \cdot 10^{57}$	11,14
LFSR113	—	—	—	—	—	—	$1,0 \cdot 10^{34}$	2,98

Мы обнаружили (*Barash, Shchur, 2009*), что быстроедействие большинства генераторов можно существенно ускорить при помощи команд Streaming SIMD Extensions процессоров Intel и AMD, используя 128-битные XMM-регистры, чтобы ускорить вычисления. Например, как видно из табл. 3, SSE2-алгоритм может ускорить производительность генератора GRI примерно в 23 раза. На рис. 3, 4 приведены основные SSE-алгоритмы, используемые для ускорения вычислений в генераторах, в основе которых лежит «преобразование кошки».

При помощи SSE-команд можно также повысить быстроедействие генераторов MRG32k3a, LFSR113, MT19937. Скорость работы MRG32k3a увеличена примерно в 2,3 раза, LFSR113 — в 1,5 раза, MT19937 — примерно в 1,4 раза.

<pre> unsigned long x[4],y[4];  [...]  asm("movaps (%0),%%xmm0\n" \ "movaps (%1),%%xmm1\n" \ "padd %xmm1,%%xmm0\n" \ "padd %xmm1,%%xmm0\n" \ "movaps %%xmm0,%%xmm2\n" \ "pslld \$2,%%xmm0\n" \ "padd %xmm1,%%xmm0\n" \ "movaps %%xmm0,(%0)\n" \ "psubd %xmm2,%%xmm0\n" \ "movaps %%xmm0,(%1)\n" \ ""::"r"(x),"r"(y)); </pre>	<pre> unsigned long i,newx[4],x[4],y[4];  [...]  for(i=0;i&lt;4;i++){ newx[i]=4*x[i]+9*y[i]; y[i]=3*x[i]+7*y[i]; x[i]=newx[i]; } </pre>
--	---

**Рис. 3.** SSE-алгоритм для генератора GRI, эквивалентные реализации. Слева представлена ассемблерная вставка для GCC для процессора, поддерживающего SSE2-команды. Справа — эквивалентный код на языке ANSI C

Для ускорения генератора LFSR113 требуется процессор Intel, поддерживающий систему команд SSE4, для остальных генераторов достаточно использовать любой из процессоров Intel или AMD, поддерживающий систему команд SSE2.

<pre> unsigned long x[16],output;  [...]  asm("movaps (%1),%%xmm0\n" \ "movaps 16(%1),%%xmm1\n" \ "movaps 32(%1),%%xmm2\n" \ "movaps 48(%1),%%xmm3\n" \ "psrld \$31,%%xmm0\n" \ "psrld \$31,%%xmm1\n" \ "psrld \$31,%%xmm2\n" \ "psrld \$31,%%xmm3\n" \ "packssdw %%xmm1,%%xmm0\n" \ "packssdw %%xmm3,%%xmm2\n" \ "packsswb %%xmm2,%%xmm0\n" \ "psllw \$7,%%xmm0\n" \ "pmovmskb %%xmm0,%0\n" \ ""::"r"(output):"r"(x)); </pre>	<pre> const unsigned long halfg=2147483648; unsigned long x[16],i,output=0,bit=1;  [...]  for(i=0;i&lt;16;i++){ output+=(x[i]&lt;halfg)?0:bit; bit*=2; } </pre>
--	---

**Рис. 4.** SSE-алгоритм для упаковки 16 старших битов 16 целых чисел в одно целое число, эквивалентные реализации. Слева представлена ассемблерная вставка для GCC для процессора, поддерживающего SSE2-команды. Справа — эквивалентный код на языке ANSI C

## Литература

- Кнут Д. Э. Искусство программирования. 3-е изд. М.: Вильямс, 2000. Т. 2 (Получисленные алгоритмы).
- Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. М.: Мир, 1984.
- Шустер Г. Детерминированный хаос. Введение. М.: Мир, 1988.
- Arnol'd V. I., Avez A. Ergodic Problems of Classical Mechanics. N. Y.: Nenjamin, 1968.
- Barash L., Shchur L. N. // Physical Rev. 2006. V. E 73. P. 036701.
- Barash L., Shchur L. N. Program library for random number generation, SSE2 realization // Comp. Phys. Communs. (Submitted). 2009.
- Beach K. S. D., Lee P. A., Monthoux P. // Physical Rev. Letters. 2004. V. 92. P. 026401.
- Binder K., Heermann D. W. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. Berlin: Springer-Verlag, 1992.
- Bizzarri A. R. // J. Phys.: Cond. Mat. 2004. V. 16. P. R83.
- Blum L., Blum M., Shub M. // SIAM J. of Comp. 1986. V. 15. P. 364.
- Chapman R. Notes on Algebraic Numbers. <http://www.secamlocal.ex.ac.uk/people/staff/rjchapma/notes/alg.n.pdf> (1995, 2002)
- Cohn H. A Second Course in Number Theory. N. Y.: Wiley, 1962. [Reprinted by Dover, New York with the title *Advanced Number Theory* (1980)].
- Coveyou R. R., McPherson R. D. // J. ACM. 1967. 14. 100; Marsaglia G. // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 1968. V. 61. P. 25.
- Ferrenberg A. M., Landau D. P., Wong Y. J. // Physical Rev. Letters. 1992. V. 69. P. 3382.
- Golomb S. W. Shift Register Sequences. San Francisco: Holden-Day, 1967.
- Grassberger P. // Physical Letters. 1993. V. 181. P. 43.
- Keating J. P. Asymptotic properties of the periodic orbits of the cat maps // Nonlinearity. 1991. V. 4. P. 277–307.
- Landau D. P., Binder K. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- L'Ecuyer P. // Annu. Oper. Res. 1994. V. 53. P. 77.
- L'Ecuyer P. // Math. of Comp. 1996. V. 65. P. 203.
- L'Ecuyer P. // Oper. Res. 1999. V. 47. P. 159.
- L'Ecuyer P. // Math. of Comp. 1999. V. 68. P. 261.
- L'Ecuyer P., Simard R. [Электронный ресурс] TestU01: A Software Library in ANSI C for Empirical Testing of Random Number Generators. Software user's guide. <http://www.iro.umontreal.ca/~simardr/testu01/tu01.html>. 2002
- Luchow A. // Annu. Rev. Phys. Chem. 2000. V. 51. P. 501.
- Marsaglia G. Die Hard: A battery of tests for random number generators [Электронный ресурс]. <http://stat.fsu.edu/pub/diehard>.
- Matsumoto M., Tishimura T. // ACM Trans. on Mod. and Comp. Sim. 1998. V. 8. P. 3.
- Percival I. C., Vivaldi F. Arithmetical Properties of Strongly Chaotic Motions // Physica. 1987. V. 25D. P. 105–130.
- Pieper S. C., Wiring R. B. // Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 2001. V. 51. P. 53.

- Schmid F., Wilding N. B.* // Intern. J. Mod. Phys. 1995. V. C 6. P. 781.  
*Shchur L. N., Heringa J. R., Bloete H. W. J.* // Physica. A241. 1997. P. 579.  
*Shchur L. N., Bloete H. W. J.* // Phys. Rev. 1997. V. E 55. P. R4905.  
*Vattulainen I., Ala-Nissila T., Kankaala K.* // Physical Rev. Letters. 1994. V. 73. P. 2513.

**HYPERBOLIC AUTOMORPHISMS OF THE TORUS  
AND PSEUDORANDOM NUMBER GENERATION.  
PRACTICAL REALIZATIONS USING SSE COMMANDS**

**L. Yu. Barash, L. N. Shchur**

*Landau Institute for Theoretical Physics of the Russian Academy of Sciences*

The method for constructing high-quality pseudorandom number generators (RNGs) is proposed. The method is based on using an ensemble of hyperbolic automorphisms of the unit two-dimensional torus (Sinai-Arnold map or cat map) while keeping a part of the information hidden. The RNG is analyzed using the generalized Percival-Vivaldi theory. The period of the proposed RNG is analytically predicted, and also other properties are analyzed. We check our predictions numerically. Based on the method, practical realizations for the RNGs are constructed. They are tested using the known stringent batteries of statistical tests which show that the statistical properties of our best generators are not worse than those of other best modern generators. It is shown that using SSE commands for the realizations of the algorithm allows to essentially speed up random number generation.

## ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ЯВЛЕНИЙ

**А. Н. Якунчиков, В. Л. Ковалёв**

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова*

*E-mail: kovalev@mech.math.msu.su, art-ya@mail.ru*

В работе развиты динамическая модель Монте-Карло для гетерогенной рекомбинации атомов и численный метод для ее исследования. Проведены расчеты степеней заполнения каталитической поверхности в процессе рекомбинации на ней атомов азота и кислорода. Исследовалось течение газа в микро- и наноканалах с помощью метода прямого численного моделирования. Получены распределения основных параметров в канале при различных числах Кнудсена и проведено их сравнение. Выявлена тенденция изменения параметров при уменьшении поперечного размера канала. Проведено молекулярно-динамическое моделирование процессов физической адсорбции водорода в массиве углеродных нанотрубок при температурах 80–300 К. Взаимодействия описывались потенциалом Леннарда–Джонса, квантовые эффекты не учитывались. Расстояние между трубками в массиве варьировалось для нахождения оптимальной для адсорбции геометрии. Массовая и объемная плотности водорода получены как функции зазора между трубками в пучке. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 08-01-00230-а).

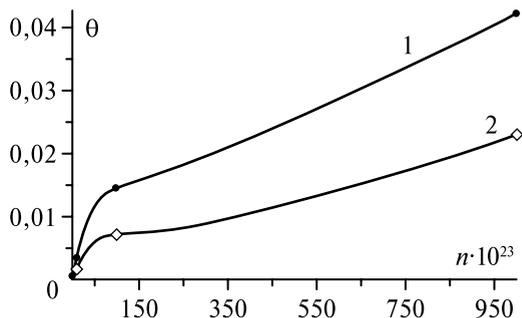
### 1. ГЕТЕРОГЕННЫЕ ПРОЦЕССЫ НА КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЯХ

Изучение поверхностных процессов, приводящих к гетерогенной рекомбинации атомов, является актуальной задачей для ряда приложений. Так, например, от поверхностных процессов существенно зависят характеристики плазменных реакторов, аэродинамический нагрев многоразовых аппаратов и загрязнение поверхности спутников на больших высотах (*Ковалёв, 2002; Kim, Boudart, 1991; Gordiets, Ferreira, 1998; Guerra, Loureiro, 2004*).

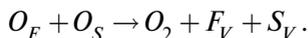
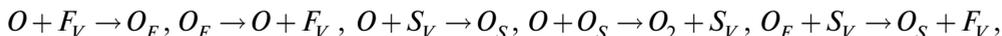
В последние годы был проведен целый ряд исследований с целью физического понимания элементарных механизмов, которые происходят на поверхности. В большинстве работ гетерогенные каталитические процессы рассматривают в детерминированной формулировке, согласно которой концентрации адсорбированных частиц представляют собой непрерывные функции времени, удовлетворяющие дифференциальным уравнениям, которые следуют из законов сохранения. Однако в ряде случаев необходим микроскопический подход, например при учете пространственного расположения адсорбированных частиц в кристаллической решетке.

В работе развиты динамическая модель Монте-Карло для анализа рекомбинации атомов на каталитической поверхности и численный метод для ее исследования. Учитывались физическая и химическая адсорбция атомов, их реком-

**Рис. 1.** Степени заполнения поверхности атомами азота (1) и кислорода (2)



бинация в реакциях Или–Райдила и Ленгмюра–Хиншельвуда и поверхностная диффузия физадсорбированных атомов:



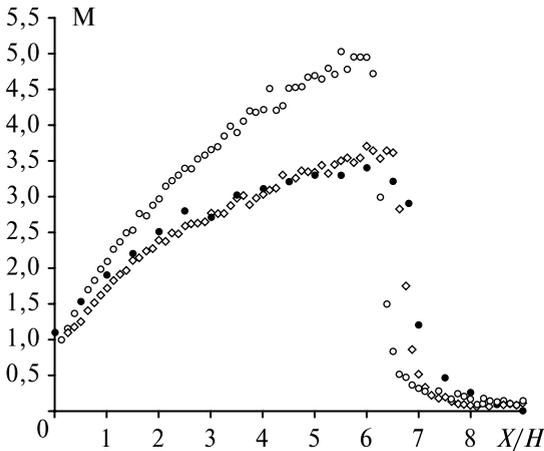
Проведены расчеты степеней заполнения каталитической поверхности в процессе рекомбинации на ней атомов азота и кислорода. Показано, что построенная модель дает хорошее согласие с результатами, полученными с помощью феноменологической модели и численными расчетами методом Монте-Карло других авторов.

На рис. 1 приведены результаты расчетов величин степеней заполнения поверхности атомами азота  $\theta_F^N$  (кривая 1) и кислорода  $\theta_F^O$  (кривая 2) в полностью диссоциированном воздухе в зависимости от концентрации атомов в газовой фазе. При достаточно больших величинах давления обнаружена линейная зависимость степеней заполнения от давления в газовой фазе.

## 2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СТРУИ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА И ПРЕГРАДЫ

Течение газов и жидкостей в большинстве случаев исследуется на основе макроскопического подхода, когда сплошная среда рассматривается как континуум. Такое описание справедливо в случаях, когда физически малый объем содержит еще достаточное число молекул и среду можно считать непрерывной. Однако при исследовании движения объектов в разреженной атмосфере, описании структуры ударной волны, моделировании физико-химических процессов в газовой среде и на поверхности необходимо использовать микроскопический подход, основанный на молекулярной динамике (*Bird, 1976; Слэзкин, 1981; Ivanov, 1998; Ковалёв и др., 2007*).

В данной работе на основе микроскопического подхода разработан и реализован эффективный метод прямого численного моделирования для исследования газовых потоков. Возможности метода продемонстрированы при исследовании поля течения струи, вытекающей из звукового сопла и взаимодействующей с преградой. В этом случае имеются как дозвуковая, так и сверхзвуковая области течения, слой смещения на границе струи, пограничный слой вдоль поверхности и «висячая» ударная волна, положение которой не известно.



**Рис. 2.** Распределение числа Маха на оси симметрии

Исследовалось взаимодействие струи разряженного газа, вытекающей из звукового сопла радиуса  $H$  с преградой, расположенной на расстоянии  $9H$ . Течение считалось плоским и симметричным относительно оси струи. В начальный момент времени  $t = 0$  заданы скорость  $\theta_1$ , температура  $T_1$  и числовая плотность потока  $n_1$  на срезе сопла и параметры покоящегося газа, за-

полняющего пространство между соплом и стенкой  $\theta_2, T_2, n_2$ .

Использовалась модель твердых сфер со стоком энергии (Bird, 1976). В рамках этой модели с каждой молекулой связывается переменная, представляющая ее внутреннюю энергию  $\varepsilon_{int} = m\varepsilon_{int}$ , где под внутренней энергией понимается сумма по всем внутренним степеням свободы.

В результате расчетов было получено распределение всех параметров течения.

Расчеты проведены при  $H = 0,024$  м,  $v_1 = a = 307$  м/с,  $T_1 = 227,5$  К, средняя длина свободного пробега в сопле  $\lambda_1 = 0,0012H$ , температура покоящегося газа, заполняющего пространство между соплом и стенкой,  $T_2 = T_{\text{топм}}$ , а средняя длина свободного пробега  $\lambda_2 = 0,15H$ . Газ считался двухатомным.

Получено, что, вытекая из сопла, поток ускоряется, а на расстоянии  $2H$  от преграды образуется отошедшая ударная волна.

На рис. 2 представлено распределение числа Маха по оси течения. Светлыми кружочками показаны расчеты по модели твердых сфер, ромбиками — расчеты по модели твердых сфер со стоком энергии, а темными кружочками — расчеты (Bird, 1976). Приведенные модели хорошо определяют отход ударной волны. Однако модель твердых сфер дает завышенные значения для величины числа Маха в области, расположенной до ударной волны.

### 3. ТЕЧЕНИЕ В МИКРО- И НАНОКАНАЛАХ

Исследовалось течение газа в микро- и наноканалах с помощью метода прямого численного моделирования. Получены распределения основных параметров в канале при различных числах Кнудсена и проведено их сравнение. Выявлена тенденция изменения параметров при уменьшении поперечного размера канала.

Количество энергии, рассеиваемое системами охлаждения микроэлектронных компонентов, неуклонно увеличивается (Schmidt, Notohardjono, 2002).

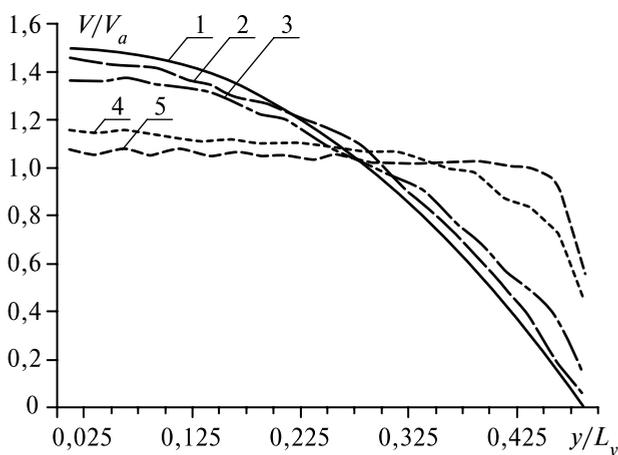
Микроэлектронные компоненты уменьшаются в размерах, поэтому вопрос об их охлаждении становится очень актуальным. Предполагается, что системы охлаждения будут состоять из микро- или наноканалов, наложенных на (или пронизывающих) электронный компонент. Прототипы таких устройств уже появились в исследовательских институтах США.

Течение газов и жидкостей в большинстве случаев исследуется на основе макроскопического подхода. Такое описание справедливо, когда изучаемый объем содержит еще достаточное число молекул и среду можно считать непрерывной. Однако при изучении течения в микроканалах, моделировании физико-химических процессов в газовой среде и на поверхности необходимо использовать микроскопический подход, учитывающий корпускулярную структуру газа (*Bird*, 1976; *Слэзкин*, 1981; *Ivanov*, 1998; *Ковалёв* и др., 2007; *Nedea et al.*, 2006).

В данной работе исследовалось течение газа в микро- и наноканалах с помощью метода прямого моделирования (*Bird*, 1976).

Молекулы представлялись в виде упругих сфер (модель твердых сфер). Для описания взаимодействия газа со стенкой использовалась диффузная модель: скорости молекул после распределяются согласно равновесной максвелловской функции. Канал был представлен двумя пластинами, расположенными на расстоянии  $L_y$ . Газ на входе в канал имел температуру  $T_g = 0,9T_0$ , температура пластины  $T_w = T_0$ . Рассматривалось стационарное течение, результаты осреднялись по времени.

Распределения плотности, скорости и температуры в канале (рис. 3) были получены для различных чисел Кнудсена  $Kn = \lambda/L_y$ , где  $\lambda$  — длина свободного пробега. При малых числах Кнудсена (сплошная среда) получен параболический



**Рис. 3.** Распределение безразмерной скорости ( $V_a$  — средняя по сечению канала скорость). 1 — решение уравнений Навье – Стокса; 2–5 — прямое моделирование при  $Kn = 0,0003$  (2);  $0,012$  (3),  $0,03$  (4),  $0,06$  (5)

профиль и вычисления совпали с решением уравнений Навье – Стокса. При увеличении  $K_p$  профиль скорости практически выравнивается. Это существенно отличается от результатов механики сплошной среды, поэтому для изучения течения в микро- и наноканалах необходимо использовать микроскопический подход.

#### 4. АДСОРБЦИЯ ВОДОРОДА В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Водород — высокоэффективный и экологически чистый энергоноситель. Основным препятствием для стационарного и мобильного использования водорода является отсутствие эффективных способов его хранения. Один из способов решения этой проблемы — хранение водорода в адсорбированном состоянии углеродными нанотрубками, которые химически стабильны, имеют большую площадь поверхности, незначительную массу и сравнительно недорого. За последние годы опубликован ряд экспериментальных и теоретических работ, посвященных адсорбции водорода в углеродных наноструктурах (Тарасов, Гольдшлегер, 2002; Елецкий, 2004), однако не было достигнуто согласования результатов. Более ранние эксперименты (Dillon et al., 1997) свидетельствуют о высоком 5–10 % относительном массовом содержании водорода в углеродных трубках при комнатной температуре и давлениях порядка атмосферного. В последующих экспериментах (Ye et al., 1999; Lawrence, Xu Gu, 2004) содержание водорода при комнатной температуре было существенно ниже. В теоретических работах для оценки адсорбционной способности пучков нанотрубок использовались методы молекулярной динамики (Maruyama, Kimura, 2000) и статистического моделирования Монте-Карло (Hu et al., 2005). В настоящей работе проведено прямое численное моделирование адсорбции водорода на углеродных нанотрубках методами молекулярной динамики при различных давлениях и температурах.

Рассматривалась одиночная углеродная нанотрубка с киральностью (10, 10), которая окружена молекулярным водородом с давлением  $p$  и температурой  $T$ . Предполагалось, что процессы физической адсорбции происходят на внешней поверхности трубки, так как без специальной обработки концы трубки закрыты. При этом учитывалось два типа взаимодействия: между молекулами  $H_2$  и атомами С, а также молекул  $H_2$  между собой. Эти взаимодействия описывались с помощью потенциала Леннарда – Джонса 12-6:

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

где  $r$  — расстояние между частицами. Параметры  $\epsilon$  и  $\sigma$  для каждого взаимодействия взяты из (Maruyama, Kimura, 2000). Внутренними степенями свободы в молекуле  $H_2$  и квантовыми эффектами пренебрегалось.

Рассчитывались траектории большого количества частиц, имитирующих молекулы газа:

$$m \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_{\text{ТН}_2}(r_i) + \sum_{j \neq i} F_{\text{H}_2\text{H}_2}(r_i - r_j),$$

где  $m$  — масса молекулы;  $r_i$  — координаты  $i$ -й молекулы;  $F_{\text{ТН}_2}(r)$  — сила, действующая на молекулу со стороны нанотрубки;  $F_{\text{H}_2\text{H}_2}(r_i - r_j)$  — сила, действующая на  $i$ -ю молекулу со стороны  $j$ -й молекулы. В начальный момент времени в центр расчетной области размером  $80 \times 80 \times 50 \text{ \AA}$  помещался фрагмент нанотрубки длиной  $50 \text{ \AA}$ , вокруг которого регулярно распределялись молекулы водорода, со скоростью согласно равновесной функции Максвелла. Уравнения решались с постоянным шагом по времени  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-15} \text{ с}$ . Макропараметры, такие как плотность, давление и температура, находились по распределениям соответствующих молекулярных величин.

Обнаружено, что при низких температурах ( $T = 80 \text{ К}$ ) и давлении более 30 атм образуется два слоя адсорбированных молекул. Плотность второго слоя значительно меньше плотности первого, но из-за большего радиуса он существенно увеличивает массовое содержание адсорбированного водорода. При комнатной температуре и давлении до 100 атм образование второго слоя адсорбции не обнаружено.

При комнатной температуре значения относительного массового содержания адсорбированного водорода, полученные методом прямого моделирования и феноменологически, согласуются в широком интервале давлений (рис. 4). При  $T = 80 \text{ К}$  — существенно отличаются при  $p > 20 \text{ атм}$ , так как феноменологическая модель Ленгмюра описывает только монослойную адсорбцию. Массовое содержание адсорбированного водорода при  $T = 298 \text{ К}$ , найденное в (Hu et al., 2005) методом статистического моделирования Монте-Карло для одиночных трубок (кривая 5, см. рис. 4б), значительно выше значений, полученных в настоящей работе.

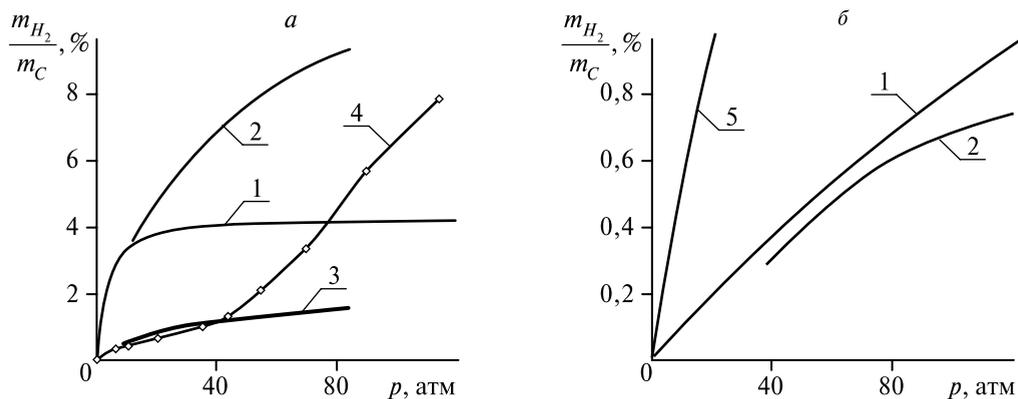
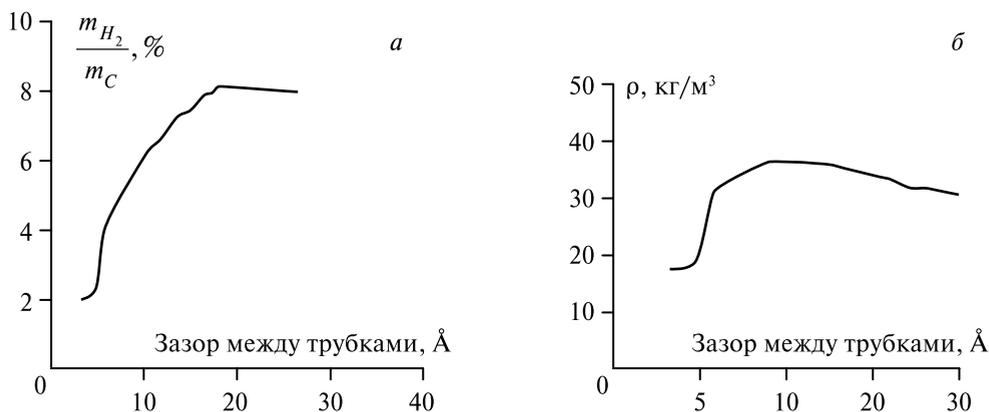


Рис. 4. Зависимость относительного массового содержания от давления при  $T = 80 \text{ К}$  (а),  $T = 298 \text{ К}$  (б)

Площадь внешней поверхности пучка приблизительно в шесть раз меньше площади внешней поверхности всех входящих в него трубок (Ye et al., 1999). Если предположить, что адсорбция происходит только на внешней поверхности пучка, относительное массовое содержание водорода в пучках будет в шесть раз меньше, чем для одиночных нанотрубок. Кривая 3 (см. рис. 4а) получена умножением результатов моделирования для одиночных трубок (кривая 2, см. рис. 4) на коэффициент 1/6. Эта оценка хорошо согласуется с экспериментальными данными для пучков (Ye et al., 1999) при давлениях ниже 50 атм. При более высоких давлениях характер экспериментальной кривой меняется, что авторы (Ye et al., 1999) объясняют изменением геометрии пучка и проникновением водорода внутрь.

С целью определения оптимального для адсорбции водорода зазора между трубками были проведены расчеты для массива из 19 трубок. Получены зависимости относительного массового содержания и объемной плотности водорода от расстояния между трубками в пучке (рис. 5). При  $T = 80$  К и  $p = 50$  атм обнаружено, что объемная плотность водорода имеет максимум при зазоре между трубками  $\sim 1$  нм. Относительное массовое содержание возрастает при удалении трубок друг от друга и достигает максимального значения около 8 % при зазоре  $\sim 2$  нм. При дальнейшей сепарации трубок относительное массовое содержание выходит на уровень, полученный для одиночных трубок.

Разработан эффективный метод молекулярно-динамического моделирования процессов адсорбции водорода углеродными нанотрубками. Найдена зависимость относительного массового содержания адсорбированного водорода от давления при температуре 80 и 298 К, которая хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными. Установлено, что при  $T = 80$  К и  $p > 30$  атм образовывается два слоя адсорбированных молекул, что существенно увеличивает массовое содержание водорода. При комнатной температуре и давлении до 100 атм образование второго адсорбированного слоя не обнаружено.



**Рис. 5.** Зависимость относительного массового содержания и объемной плотности водорода от расстояния между трубками в пучке при  $T = 80$  К,  $p = 50$  атм

Получена зависимость относительного массового и объемного содержания адсорбированного водорода от геометрии массива. Найдены оптимальные расстояния между трубками для достижения наибольшего относительного массового и объемного содержания водорода.

Расчеты проведены на СКИФ МГУ «Чебышев».

### Литература

- Елецкий А. В.* Сорбционные свойства углеродных наноструктур // Успехи физ. наук. 2004. Т. 174. № 11. С. 1191–1231.
- Ковалёв В. Л.* Гетерогенные каталитические процессы в аэротермодинамике. М.: Физматлит. 2002.
- Ковалёв В. Л., Сазонова В. Ю., Якунчиков А. Н.* Динамический метод Монте-Карло моделирования поверхностной рекомбинации // Вестн. Московского ун-та. Сер. 1. Математика. Механика. 2007. № 2. С. 67–72.
- Слёзкин Н. А.* Лекции по молекулярной гидродинамике. М.: Изд-во МГУ, 1981.
- Тарасов Б. П., Гольдшлегер Н. Ф.* Сорбция водорода углеродными наноструктурами // Альтернативная энергетика и экология. 2002. № 3. С. 29–39.
- Bird G. A.* Molecular gas dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1976.
- Dillon A. C., Jones K. M., Bekkedahl T. A., Kiang C. H., Bethune D. S., Heben M. J.* Storage of hydrogen in single-walled carbon nanotubes // Nature. 1997. V. 386. Nr. 6623. P. 377–379.
- Gordiets B. F., Ferreira C. M.* Self-consistent modeling of volume and surface processes in air plasma // AIAA J. 1998. V. 36. Nr. 9. P. 1643–1651.
- Guerra V., Loureiro J.* Dynamical Monte Carlo simulation of surface atomic recombination // Plasma Sources Sci. Technol. 2004. V. 13. P. 85–94.
- Hu N., Sun X., Hsu A.* Monte Carlo simulation of hydrogen adsorption in alkali-doped single-walled carbon nanotubes // J. Chemical Physics. 2005. V. 123. Nr. 4. P. 044708.1–044708.10.
- Ivanov M. S.* Computational hypersonic rarefied flows // Annu. Rev. Fluid Mechanics. 1998. V. 30. P. 469–505.
- Kim Y. C., Boudart M.* Recombination of O, N and H atom on silica: kinetics and mechanism // J. Langmuir. 1991. Nr. 7. P. 2999–3005.
- Lawrence J., Xu Gu.* High pressure saturation of hydrogen stored by single-wall carbon nanotubes // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. Nr. 6. P. 918–920.
- Maruyama S., Kimura T.* Molecular dynamics simulation of hydrogen storage in single-walled carbon nanotubes // 2000 ASME Intern. Mechanical Engineering Congr. and Exhibit. 2000. P. 405–409.
- Nedea S. V., Markvoort A. J., Frijns A. J., Steenhoven A. A., Hilbers P. A.* Hybrid Molecular Dynamics — Monte Carlo method for heat and flow analysis in micro/nano-channels // Proc. 25-th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. St-Petersburg, July, 21–28. 2006.
- Schmidt R. R., Notohardjono B. D.* High and server low temperature cooling // IBM Journal of Research and Development. 2002. V. 46. P. 739–751.

*Ye Y., Ahn C. C., Witham C., Fultz B., Liu J., Rinzler A. G., Colbert D., Smith K. A., Smalley R. E.* Hydrogen adsorption and cohesive energy of single-walled carbon nanotubes // *Appl. Phys. Lett.* 1999. V. 74. Nr. 16. P. 2307–2309.

**DIRECT NUMERICAL SIMULATION  
OF SOME PHYSICAL-CHEMICAL PROCESSES**

**A. N. Yakunchikov, V. L. Kovalev**

*Lomonosov Moscow State University*

The dynamic Monte Carlo model and numerical method was formed for heterogeneous recombination. The fractional surface coverage of physisorbed and chemisorbed sites was obtained for nitrogen and oxygen atomic recombination. Gas flow in micro/nano-channels was investigated through direct simulation method. The distributions of density, velocity and temperature in the channel were obtained and analyzed with different Knudsen numbers. The tendency of parameters behaviour with an increase Knudsen number was found. The hydrogen adsorption in carbon nanotube arrays was studied through molecular dynamics simulation at temperatures 80–300 K. Interactions were expressed by Lennard – Jones functions, quantum effects were neglected. The tube spacing has been varied to optimize geometry for adsorption. Volumetric and gravimetric densities were obtained as functions of intertube spacing. Work was supported by Russian Foundation for Basic Research (Nr. 08-01-00230 a).

## МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ АТОМОВ КИСЛОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ $Al_2O_3$ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

**В. Л. Ковалёв<sup>1</sup>, А. А. Крупнов<sup>2</sup>, М. Ю. Погосбемян<sup>2</sup>, Л. П. Суханов<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,  
механико-математический факультет. E-mail: valerykovalev@yandex.ru*

<sup>2</sup> *Научно-исследовательский институт механики Московского государственного  
университета им. М. В. Ломоносова. E-mail: kroupnov@imec.msu.ru*

<sup>3</sup> *Российский научный центр «Курчатовский институт»  
E-mail: su Khanov1955@mail.ru*

С целью анализа каталитических свойств теплозащитных материалов космических аппаратов на основе теории функционала плотности построены кластерные модели адсорбции атома кислорода на поверхности  $Al_2O_3$ . Рассчитана поверхность потенциальной энергии (ППЭ), отвечающая ориентационному взаимодействию атома  $O(^3P)$  с кластером  $Al_4O_6$ , моделирующим поверхность кристалла  $\alpha-Al_2O_3$ . Квантово-механические расчеты позволили выявить ряд важных особенностей ППЭ для последующего описания гетерогенных каталитических процессов с применением методов молекулярной динамики. В рамках классического приближения методами молекулярной динамики на основании представленной ППЭ-адсорбции атомов кислорода на поверхности кластера  $Al_4O_6$  проведено моделирование процесса гетерогенной рекомбинации атомов кислорода по механизму Или – Райдила. Результаты моделирования показали, что для корректного описания исследуемого процесса необходимо использовать ППЭ, полученную с учетом релаксации поверхностных монослоев, а также угловые зависимости рассчитанной ППЭ. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 08-01-00230-а).

Гетерогенные каталитические процессы играют ключевую роль при определении теплового потока к поверхности летательного аппарата при его гиперзвуковом обтекании. Выявление механизма этих процессов и определение их основных характеристик имеют решающее значение для эффективного конструирования теплозащитных систем современных космических аппаратов. Актуальность исследования каталитических свойств теплозащитных покрытий не снижается в связи с тем, что для перспективных гиперзвуковых летательных аппаратов разрабатываются новые материалы, которые должны обеспечивать тепловую защиту при температурах поверхности около 2000 К. Кроме того, весьма актуальными стали вопросы снижения тепловых нагрузок на поверхность космических аппаратов и зондов, предназначенных для спуска в атмосфере Марса и их последующего возвращения на Землю.

До настоящего времени процессы гетерогенного катализа остаются недостаточно изученными как теоретически, так и экспериментально. Определенные из экспериментальных данных эффективные величины коэффициентов

скоростей гетерогенных реакций у разных авторов отличаются на порядки. А построенные на основе детализации механизма гетерогенных процессов кинетические модели включают ряд параметров, которые определяются из сравнения с данными экспериментов. При многопараметрической зависимости такой подход может быть неоднозначным.

В последние годы по мере развития возможностей компьютерной техники стали применяться новые подходы, основанные на использовании методов квантовой механики и молекулярной динамики (Воронин, Ошеров, 1990; Cacciatore et al., 1999; Billing, 2000; Kovalev, Pogosbekian, 2006). Они позволяют лучше понять механизм гетерогенных каталитических процессов, проанализировать их элементарные стадии и оценить влияние различных микроструктур материалов на каталитические явления. При этом могут быть найдены коэффициенты скоростей элементарных реакций на поверхности, распределение энергии внутренних степеней свободы продуктов реакций, энергия обмена между поверхностью и химической системой. Эта информация очень важна для оценки величины тепловых потоков к поверхности от формируемых на ней молекул.

Данная работа посвящена моделированию адсорбции атомов кислорода на поверхности  $\text{Al}_2\text{O}_3$  на основе теории функционала плотности (ТФП) (Hohenberg, Kohn, 1964; Kohn, Sham, 1965), а также изучению процессов гетерогенной рекомбинации атомов O методами молекулярной динамики.

## МЕТОДЫ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

В отличие от подходов, основанных на поиске приближенной волновой функции многоэлектронной молекулярной системы, ТФП оперирует с функцией трех переменных — электронной плотностью системы  $\rho(\vec{r})$ . Методы ТФП исходят из утверждения теоремы, доказанной в 1964 г. П. Хоэнбергом и В. Коном (Hohenberg, Kohn, 1964), о том, что для основного электронного состояния энергия является функционалом лишь электронной плотности  $\rho(\vec{r})$ . Однако теорема не дает конкретного вида этого функционала.

Согласно работе В. Кона и Л. Шэма 1965 г. (Kohn, Sham, 1965), функционал энергии приближается суммой

$$E(\rho(\vec{r})) = E^T + E^V + E^J + E^{XC}, \quad (1)$$

где  $E^T$  — кинетическая энергия электронов;  $E^V$  — потенциальная энергия притяжения электронов к ядрам, включая отталкивание между парами ядер;  $E^J$  — энергия кулоновского межэлектронного отталкивания и  $E^{XC}$  — обменно-корреляционный потенциал, включающий оставшуюся часть межэлектронных взаимодействий. Здесь  $\rho(\vec{r})$  — полная электронная плотность:

$$\rho(\vec{r}) = \rho_\alpha(\vec{r}) + \rho_\beta(\vec{r}), \quad (2)$$

состоящая из  $\alpha$ - и  $\beta$ -спиновых плотностей, каждая из которых записывается через молекулярные орбитали (МО)  $\varphi_i^Y(\vec{r})$  многоэлектронной системы:

$$\rho_\gamma(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_\gamma} |\varphi_i^\gamma(\vec{r})|^2, \quad (\gamma = \alpha, \beta). \quad (3)$$

Верхний индекс в сумме означает количество электронов в соответствующем спиновом состоянии. В основном электронном состоянии сумма берется по  $N_\gamma$  нижним собственным значениям, чтобы удовлетворить принципу запрета Паули. Проведение компьютерных расчетов электронного строения предполагает построение МО  $\varphi_i^\gamma(\vec{r})$  в виде линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО)  $\chi_q(\vec{r})$ :

$$\varphi_i^\gamma(\vec{r}) = \sum_{q=1}^M c_{qi}^\gamma \chi_q(\vec{r}), \quad (4)$$

где число базисных функций  $M \geq N_\alpha + N_\beta$ . В приближении МО ЛКАО (4) набор базисных функций  $\{\chi_q(\vec{r})\}_{q=1}^M$  задается, а коэффициенты разложения  $c_{qi}^\gamma$  подлежат дальнейшему определению.

Все слагаемые (1), за исключением межъядерного отталкивания, являются функциями электронной плотности  $\rho(\vec{r})$ . Энергия  $E^J(\rho)$  дается следующим выражением:

$$E^J(\rho) = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (5)$$

Сумма  $E^T + E^V + E^J$  соответствует классической энергии зарядового распределения  $\rho$ . Последнее слагаемое  $E^{XC}$  в равенстве (1) включает в себя: обменную энергию, обусловленную антисимметрией волновой функции в квантовой механике, и энергию коррелированных движений отдельных электронов. Хоэнберг и Кон (*Hohenberg, Kohn, 1964*) показали, что  $E^{XC}$  полностью определяется электронной плотностью  $\rho$ . На практике  $E^{XC}$  приближается интегралом от функции спиновых плотностей и, возможно, их градиентов:

$$E^{XC}(\rho) \int f(\rho_\alpha(\vec{r}), \rho_\beta(\vec{r}), \nabla\rho_\alpha(\vec{r}), \nabla\rho_\beta(\vec{r})) d\vec{r}. \quad (6)$$

Обычно  $E^{XC}(\rho)$  разбивается на отдельные обменные и коррелированные составляющие:

$$E^{XC}(\rho) = E^X(\rho) + E^C(\rho). \quad (7)$$

Обе компоненты в правой части (7) могут быть двух типов: локальные функционалы, зависящие лишь от электронной плотности  $\rho$ , и функционалы с градиентными поправками, зависящие как от  $\rho$ , так и ее градиентов  $\nabla\rho$ . Например, для описания обменной энергии однородного электронного газа используется локальный обменный функционал

$$E_{LDA}^X = -\frac{3}{2} \left( \frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \int \rho^{4/3}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (8)$$

Однако такой функционал (8) мало пригоден для описания молекулярных систем.

А. Беке в 1988 г. (Becke, 1988) построил обменный функционал с градиентными поправками  $\Delta E_{B88}^X$  на основе локального обменного функционала (8):

$$E_{B88}^X = E_{LDA}^X + \Delta E_{B88}^X, \quad (9)$$

который сейчас широко применяется в квантово-химических расчетах. А. Беке (Becke, 1993) также сформировал гибридные функционалы, которые представляют собой смесь хартри-фоковского (ХФ) и обменного взаимодействия ТФП вместе с корреляцией ТФП:

$$E_{hybrid}^{XC} = C_{HF} E_{HF}^X + C_{DFT} E_{DFT}^{XC}, \quad (10)$$

где  $C$  — константы. В настоящей работе использовался гибридный трехпараметрический обменный функционал Беке (Becke, 1988, 1993) с корреляционным функционалом Ли — Янга — Парра (Lee et al., 1988), т. е. функционал V3LYP

$$E_{V3LYP}^{XC} = E_{LDA}^X + C_0 (E_{HF}^X - E_{LDA}^X) + C_X \Delta E_{B88}^X + E_{VWN3}^C + C_C (E_{LYP}^C - E_{VWN3}^C), \quad (11)$$

где  $E_{VWN3}^C$  — локальный корреляционный функционал Воско — Уилка — Ньюсайра (Vosko et al., 1980),  $E_{LYP}^C$  — корреляционный функционал (Lee et al., 1988), включающий как локальные, так и нелокальные члены. В функционал V3LYP Беке (Becke, 1993) ввел три подгоночных параметра  $C_0$ ,  $C_X$  и  $C_C$ , которые он определил фитированием энергий атомизации, потенциалов ионизации, средства к протону и атомных энергий для ряда хорошо изученных молекул.

Отметим, что при моделировании сложных многоэлектронных систем методы ТФП позволяют эффективно заменить «катастрофу  $M^4$ », с которой сталкиваются в смысле затрат компьютерного времени традиционные *ab initio* методы, на «неприятность  $M^2$ », где  $M$  — число базисных функций в МО ЛКАО-разложении (4).

## МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ), отвечающая взаимодействию атома  $O(^3P)$  с кластером  $Al_4O_6$ , моделирующим поверхность кристалла  $\alpha-Al_2O_3$ , рассчитывалась с помощью программы GAUSSIAN98 (Frisch et al., 1998). Рассчитанные с разными наборами базисных функций методом V3LYP молекулярные постоянные основного электронного состояния  $O_2$ ,  $AlO$  и  $Al_2$  представлены в табл. 1. Для сравнительного анализа полученных результатов в табл. 1 приводятся также экспериментальные данные (Хьюбер, Герцберг, 1984; Молекулярные постоянные..., 1979).

Как видно из этой таблицы, лишь начиная с валентно-расщепленного базиса Попла 6-31G\* (Hariharan, Pople, 1973) хорошо воспроизводятся параметры парных взаимодействий атомов O и Al. Этот базис состоит из сгруппированных базисных функций  $[4s3p1d]_{Al} + [3s2p1d]_O$  (в квадратных скобках указывается количество базисных функций каждого типа на атомных центрах молекул).

**Таблица 1.** Рассчитанные с разными базисами методом ВЗЛР свойства основного электронного состояния молекул  $O_2$ ,  $AlO$  и  $Al_2$ , включая длину связи ( $R$ ), гармоническую колебательную частоту ( $\omega_e$ ) и энергию диссоциации ( $D_0$ )

Свойства	Молекула								
	$O_2(^3\Sigma_g^-)$			$AlO(^2\Sigma^+)$			$Al_2(^3\Sigma_g^-)$		
	$R, \text{Å}$	$\omega_e, \text{см}^{-1}$	$D_0, \text{эВ}$	$R, \text{Å}$	$\omega_e, \text{см}^{-1}$	$D_0, \text{эВ}$	$R, \text{Å}$	$\omega_e, \text{см}^{-1}$	$D_0, \text{эВ}$
6-31G	1,25	1435	4,09	1,70	853	4,21	2,58	300	1,02
6-31+G	1,26	1422	3,95	1,71	823	4,30	2,58	299	1,01
6-31G*	1,21	1659	5,31	1,64	948	4,91	2,51	323	1,17
6-31+G*	1,22	1642	5,13	1,65	926	4,97	2,51	322	1,15
Эксперимент	1,21	1580	5,12	1,62	979	$5,27 \pm 0,04$	2,47	350	1,5 <sub>5</sub>

В описании валентных электронов базис 6-31G\* соответствует двухэкспонентному базису (по две базисные функции на атомную орбиталь (АО)) с включением внешних поляризационных функций  $d$ -типа на атомах O и Al. АО остовных электронов представлены одной базисной функцией. Базисный набор 6-31G\* обладает большей полнотой по сравнению с базисами 6-31G и 6-31+G, у которых поляризационные  $d$ -функции отсутствуют. Из табл. 1 следует, что рассчитанные с базисом 6-31G\* равновесные межъядерные расстояния отличаются от экспериментальных величин не более чем на 0,04 Å, а гармонические частоты колебаний согласуются с их экспериментально найденными значениями в пределах 8%. Средняя погрешность для энергии диссоциации составляет с базисом 6-31G\* в системе связей атомов O и Al ~ 0,3 эВ. Эту погрешность можно уменьшить до 0,2 эВ, добавив в базисный набор 6-31G\* по одной диффузной функции  $s$ - и  $p$ -типа на каждом из атомных центров, т. е. переходя к базису 6-31+G\*.

**Таблица 2.** Рассчитанные с разными базисами методом ВЗЛР равновесные геометрические параметры и энергия адсорбции ( $E_{ads}$ ) комплекса  $O(^3P) - Al_4O_6$  ( $C_{3v}$ -симметрия)

Свойства	Базис			
	6-31G	6-31+G	6-31G*	6-31+G*
$R(Al_2-O_1), \text{Å}$	1,81	1,82	1,76	1,77
$R(Al_2-O_{3,4,5}), \text{Å}$	1,83 (1,78)*	1,83 (1,78)	1,81 (1,74)	1,81 (1,75)
$\angle O_1-Al_2-O_{3,4,5}, \text{град}$	120 (108)	120 (108)	117 (105)	117 (106)
$R(Al_{6,7,8}-O_{3,4,5}), \text{Å}$	1,77 (1,78)	1,77 (1,78)	1,74 (1,74)	1,75 (1,75)
$\angle Al_2-O_{3,4,5}-Al_{6,7,8}, \text{град}$	120 (106)	121 (106)	114 (101)	115 (102)
$R(Al_2-O_{9,10,11}), \text{Å}$	3,71 (3,38)	3,71 (3,39)	3,60 (3,30)	3,61 (3,31)
$\angle O_1-Al_2-O_{9,10,11}, \text{град}$	153 (150)	153 (150)	152 (149)	152 (149)
$E_{ads}, \text{эВ}$	1,83	1,75	1,79	1,67

\* В скобках приведены соответствующие геометрические параметры кластера  $Al_4O_6$  ( $T_d$ -симметрия).

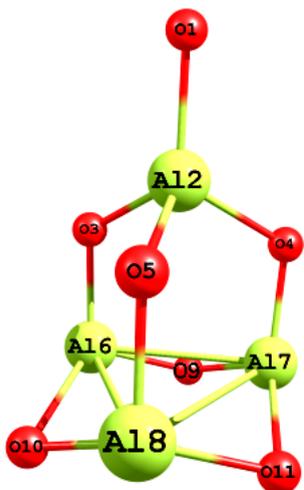
Отличие в 0,1 эВ отмечается также при описании энергии адсорбции комплекса  $O(^3P) - Al_4O_6$  ( $C_{3v}$ -симметрия) с использованием базисов  $6-31G^*$  и  $6-31+G^*$  (табл. 2, рис. 1). Однако возрастание точности расчетов ППЭ на 0,1 эВ сопряжено с увеличением числа базисных функций для системы  $O - Al_4O_6$  со 181 до 225, что приводит к увеличению затрат компьютерного времени примерно в два раза. Поэтому во всех наших расчетах ППЭ-взаимодействия атома  $O$  с кластером  $Al_4O_6$  в качестве оптимального между точностью описания ППЭ и затратами компьютерного времени был выбран базисный набор Попла  $6-31G^*$  (Hariharan, Pople, 1973).

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

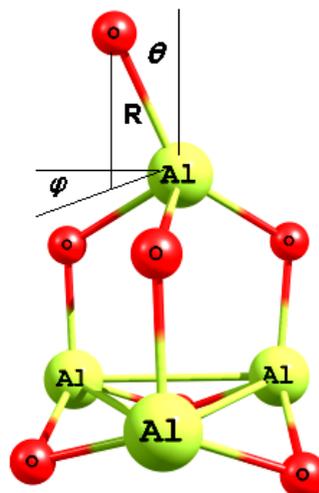
Хемосорбция — это процесс образования химических связей между адсорбатом (атомом, молекулой) и адсорбентом (например, поверхностью твердого тела). Поскольку образование химических связей обусловлено короткодействующими силами, то для описания локальных взаимодействий при хемосорбции весьма эффективными оказываются кластерные подходы. Кластер — сравнительно небольшой фрагмент решетки твердого тела, составленный из конечного числа атомов поверхностного слоя и атомов приповерхностных слоев. В таком подходе открывается возможность прямого использования в расчетах методов квантовой механики, имеющих дело с ограниченными по размеру молекулярными системами.

В нашем случае поверхность кристалла  $\alpha-Al_2O_3$  моделировалась кластером  $Al_4O_6$ , передающим стехиометрию кристалла и валентное состояние лежащих на поверхности  $Al_2O_3$  атомов  $Al$ . Для моделирования адсорбции атомарного кислорода на поверхности  $Al_2O_3$  атомы кислорода нижней плоскости фиксировались в своих положениях, занимаемых в кластере  $Al_4O_6$ .

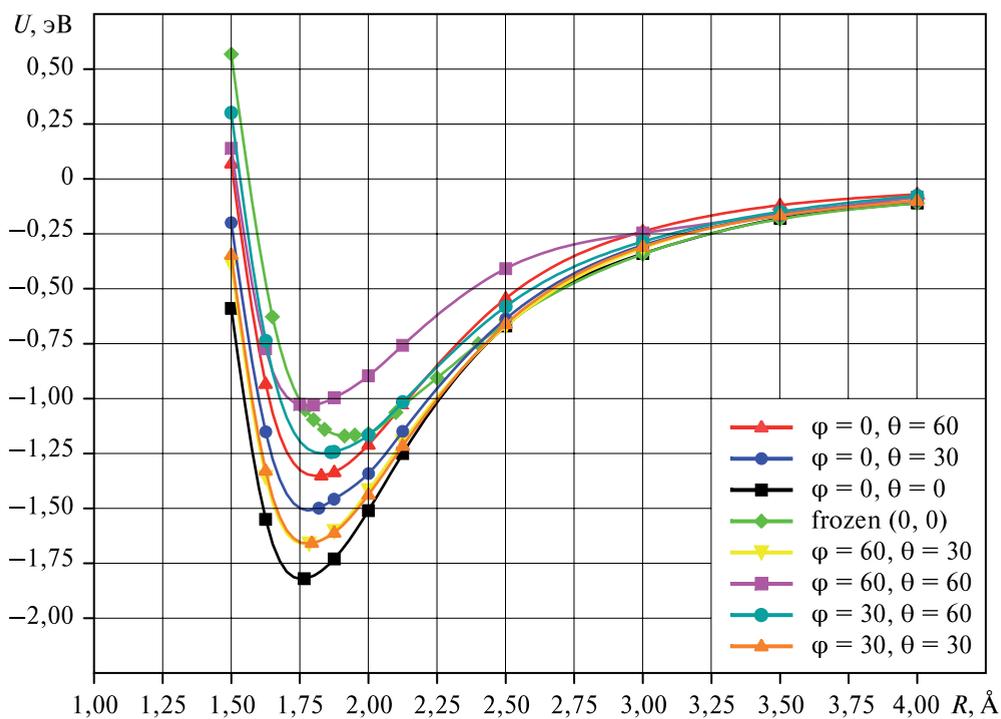
Положения остальных атомов оптимизировались при заданных координатах  $R$ ,  $\theta$  и  $\phi$  адсорбируемого атома  $O(^3P)$  (рис. 2). Такая модель учитывает релаксацию поверхностных монослоев, вызванную взаимодействием с адсорбатом. Выполненные нами расчеты показывают важность процессов структурной релаксации поверхностных атомов. При сближении атома  $O(^3P)$  по направлению нормали к поверхности ( $\theta = 0^\circ$ ) до равновесного расстояния  $R_e = 1,77 \text{ \AA}$  (рис. 3) расстояние между верхними плоскостями атомов  $O$  и  $Al$  (см. рис. 2) увеличивается более чем на 70 %, а вклад энергии релаксации в энергию адсорбции  $E_a = 1,8 \text{ эВ}$  составляет 30 % по сравнению с моделью, не учитывающей релаксацию структурных параметров (кривая, отмеченная ромбиками на рис. 3). Подобные эффекты структурной релаксации поверхности  $Al_2O_3$  выявлены при изучении адсорбции на ней молекул  $H_2O$  (Wittbrodt et al., 1998; Fernandez et al., 2007) и  $O_2$  (Fernandez et al., 2007). Заметим, что энергия адсорбции молекулярного кислорода на поверхности  $Al_2O_3$ , по данным работы (Fernandez et al., 2007), составляет 0,6 эВ при равновесном расстоянии 1,98  $\text{ \AA}$ , отсчитанном от нижнего атома  $O$  молекулы  $O_2$ .



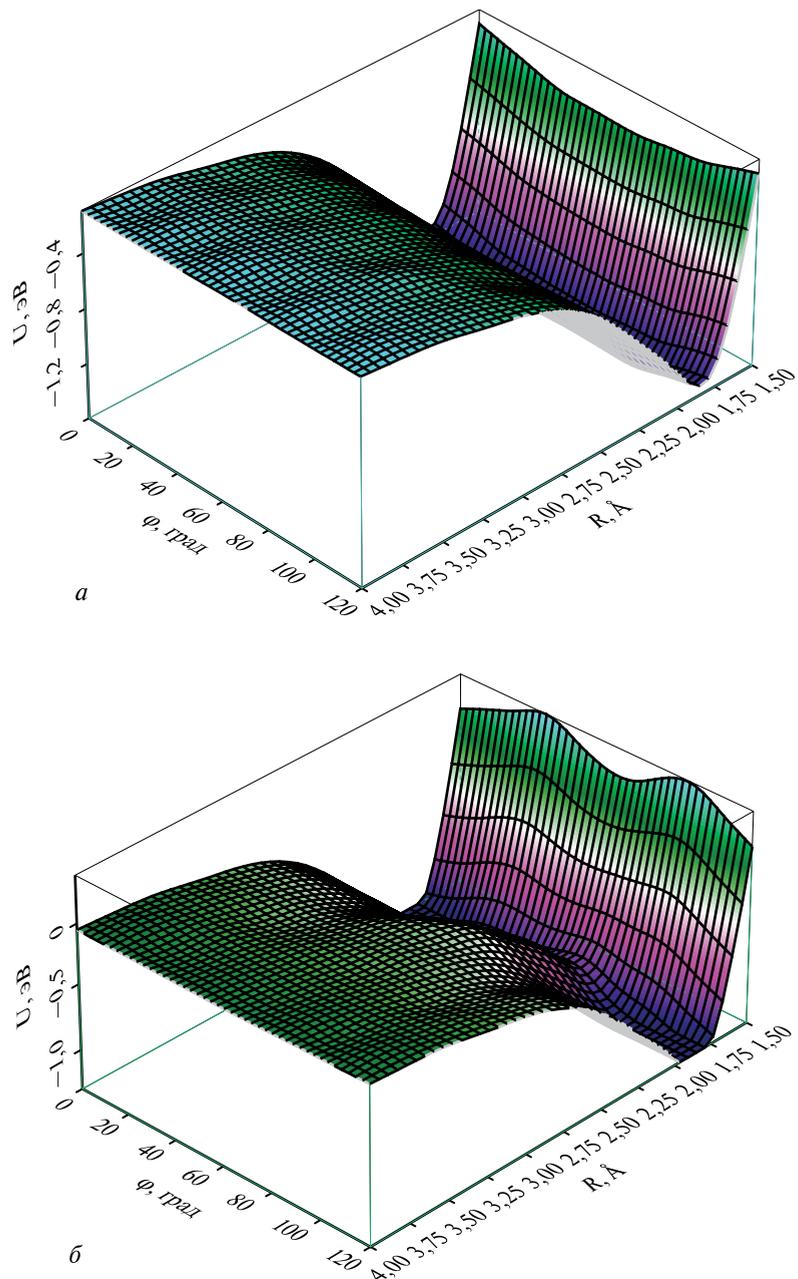
**Рис. 1.** Геометрическая структура комплекса  $\text{O}(^3\text{P}) - \text{Al}_4\text{O}_6$  симметрии  $C_{3v}$



**Рис. 2.** Кластерная модель адсорбции атома кислорода на поверхности  $\text{Al}_2\text{O}_3$



**Рис. 3.** Потенциальные кривые  $U(R)$ , отвечающие взаимодействию атомарного кислорода  $\text{O}(^3\text{P})$  с кластером  $\text{Al}_4\text{O}_6$ :  $R$  — расстояние между атомом  $\text{O}(^3\text{P})$  и атомом Al, лежащим на поверхности твердого  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , при сближении атома  $\text{O}(^3\text{P})$  по разным направлениям, задаваемым углами  $\theta$  и  $\phi$ . Обозначения  $R$ ,  $\theta$  и  $\phi$  приведены на рис. 2



**Рис. 4.** Поверхность потенциальной энергии взаимодействия атомарного кислорода с кластером  $\text{Al}_4\text{O}_6$  в координатах  $R$  и  $\phi$  при угле атаки  $\theta$ :  $a$  —  $30^\circ$ ;  $b$  —  $60^\circ$

Как следует из данных рис. 3, потенциальные кривые, отвечающие ориентационному взаимодействию атома  $O(^3P)$  с кластером  $Al_4O_6$ , носят гладкий связывающий характер, что соответствует отсутствию активационных барьеров в процессе адсорбции атомарного кислорода на поверхности  $Al_2O_3$ . При одних и тех же значениях угла  $\varphi$  по мере увеличения угла атаки  $\theta$  атомом  $O(^3P)$  поверхности  $Al_2O_3$  глубина адсорбционного минимума на ППЭ уменьшается, а равновесное расстояние  $R_e$  увеличивается. При  $\theta = 30^\circ$  с ростом  $\varphi$  происходит стабилизация энергии взаимодействия в системе  $O(^3P) - Al_4O_6$ , тогда как при  $\theta = 60^\circ$  имеет место противоположная тенденция в поведении потенциальных кривых. Как при  $\varphi = 0^\circ$ , так и при  $\varphi = 60^\circ$  ядерная конфигурация адсорбционного комплекса  $O - Al_4O_6$  обладает единственным элементом симметрии — плоскостью, проходящей через образующую связь  $O - Al$  и соответствующую связь  $Al - O$  кластера  $Al_4O_6$ , т. е. комплекс характеризуется симметрией  $C_s$  (см. рис. 2). Дополнительные исследования, выполненные при  $\varphi = 60^\circ$ , показали, что понижение симметрии не изменяет потенциальной энергии взаимодействия атома  $O(^3P)$  с  $Al_4O_6$ . Наиболее высокое положение кривой  $U(R)$  при  $\varphi = 60^\circ$ ,  $\theta = 60^\circ$  среди графиков рис. 3 объясняется взаимным отталкиванием адатома кислорода и атома  $O$  кластера  $Al_4O_6$  вследствие их сближения в плоскости симметрии комплекса  $O - Al_4O_6$ .

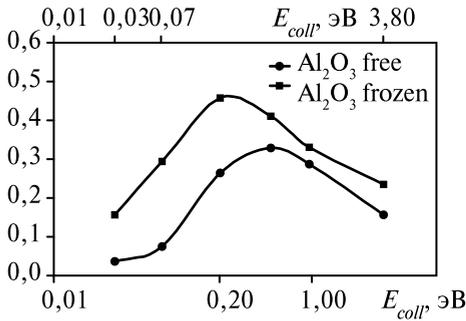
В результате расчетов также установлено, что по азимутальному углу  $\varphi$  ППЭ периодична с периодом  $120^\circ$  (рис. 4). При угле атаки  $\theta = 30^\circ$  угловая зависимость ППЭ носит слабо выраженный характер (см. рис. 4а), тогда как при  $\theta = 60^\circ$  эта зависимость становится более существенной (см. рис. 4б).

В рамках классического приближения методами молекулярной динамики на основании представленной ППЭ-адсорбции атомов кислорода на поверхности кластера  $Al_4O_6$  проведено моделирование процесса гетерогенной рекомбинации атомов кислорода по механизму Или–Райдила (*Kovalev, Pogosbekian, 2007*):

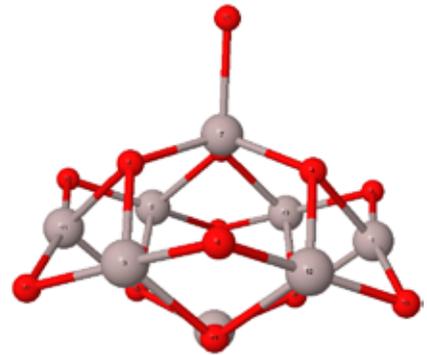


где  $O_{ad}$  — адатом кислорода на поверхности  $S$  оксида алюминия;  $O_{gas}$  — атом кислорода из газовой фазы.

На рис. 5 представлены результаты расчетов коэффициента гетерогенной рекомбинации  $\gamma$  при коллинеарном расположении атомов ( $\theta = 0^\circ$ ) для двух потенциальных кривых, одна из которых учитывает внутреннюю релаксацию  $Al_4O_6$  ( $\varphi = 0^\circ$ ,  $\theta = 0^\circ$  на рис. 3) — приближение свободных связей, а другая получена в предположении замороженных связей (frozen (0, 0) на рис. 3). По горизонтальной оси на рис. 5 отложена относительная энергия столкновения  $E_{coll}$ , которая варьировалась в диапазоне от 0,03 до 3,8 эВ. Верхняя кривая на рис. 5, помеченная квадратиками, соответствует приближению замороженных связей, нижняя кривая, помеченная кружками, — приближению свободных связей. Как следует из данных рис. 5, обе кривые имеют одинаковый качественный характер зависимостей — участок монотонного возрастания, максимум и участок монотонного убывания, однако их количественные характеристики существенно различаются.



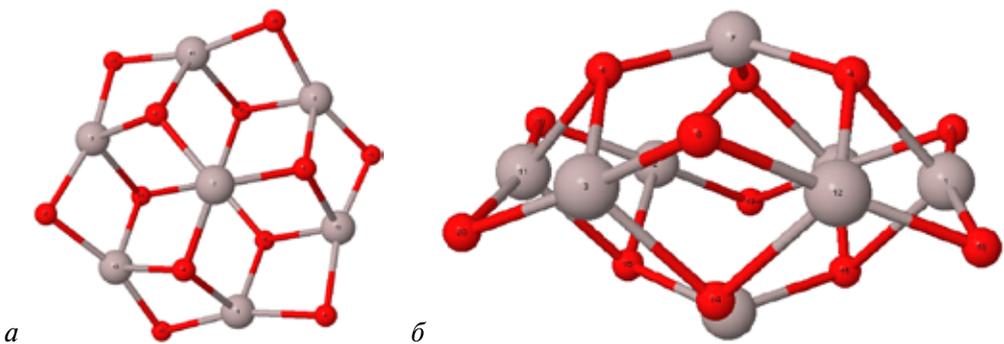
**Рис. 5.** Коэффициенты гетерогенной рекомбинации атомов кислорода на поверхности  $Al_2O_3$ , рассчитанные для коллинеарного расположения атомов ( $\theta = 0^\circ$ ), с учетом ( $Al_2O_3$  free) и без учета ( $Al_2O_3$  frozen) внутренней релаксации кластера  $Al_4O_6$



**Рис. 6.** Расширенная кластерная модель  $O(^3P) - Al_8O_{12}$  адсорбции атома кислорода на поверхности  $Al_2O_3$

Максимальная вероятность рекомбинации для приближения замороженных связей достигает значения  $\gamma = 0,457$  при  $E_{coll} = 0,2$  эВ, в приближении свободных связей не превышает значения 0,329. Данное сравнение показало, что для корректного описания гетерогенной рекомбинации атомов кислорода на поверхности кластера  $Al_4O_6$  необходимо использовать ППЭ, полученную с учетом релаксации поверхностных монослоев.

Более того, из анализа рис. 3 следует, что потенциальные кривые  $U(R)$ , построенные при разных  $\theta$  и  $\phi$  с учетом структурной релаксации, в основном лежат между двумя кривыми сближения атома  $O(^3P)$  по направлению нормали к поверхности ( $\theta = 0^\circ$ ), построенными в моделях свободных и замороженных связей. Поэтому для последующего описания гетерогенных каталитических процессов методами молекулярной динамики необходимо учитывать не только структурную релаксацию поверхности  $Al_2O_3$ , но и угловые зависимости рассчитанной ППЭ.



**Рис. 7.** Кластерная модель  $Al_8O_{12}$  поверхности  $Al_2O_3$ : при виде сверху (а) и сбоку (б)

Уточнение параметров ППЭ, отвечающей адсорбции атома  $\text{O}(^3\text{P})$  на поверхности  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ , проведено нами на основе расширенной кластерной модели  $\text{O}(^3\text{P}) - \text{Al}_8\text{O}_{12}$  (рис. 6).

Двадцатиатомный кластер  $\text{Al}_8\text{O}_{12}$  симметрии  $S_6$ , моделирующий поверхность  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , показан при виде сверху и сбоку на рис. 7а и 7б соответственно. В приближении замороженных связей кластера  $\text{Al}_8\text{O}_{12}$  энергия адсорбции на нем атома  $\text{O}(^3\text{P})$  составляет 1,24 эВ при  $\theta = 0^\circ$  (см. рис. 2) против соответствующей величины 1,17 эВ для кластера  $\text{Al}_4\text{O}_6$ . Равновесное расстояние  $R_e$  составляет 1,89 Å между верхним атомом Al кластера  $\text{Al}_8\text{O}_{12}$  и атомом  $\text{O}(^3\text{P})$  против аналогичного расстояния  $R_e = 1,91$  Å в комплексе  $\text{O}(^3\text{P}) - \text{Al}_4\text{O}_6$  ( $T_d$ -симметрия) (см. точку минимума на потенциальной кривой рис. 3, отмеченную ромбиками). Практическое совпадение параметров ППЭ позволяет надеяться на их сходимость к размеру кластера, моделирующего поверхность  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Однако для окончательного ответа на вопрос о чувствительности параметров ППЭ к размеру кластерной модели  $\text{Al}_2\text{O}_3$  необходимы расчеты, учитывающие структурную релаксацию поверхности  $\text{Al}_2\text{O}_3$  в рамках ее расширенной кластерной модели  $\text{Al}_8\text{O}_{12}$ . Проведение таких расчетов составляет предмет наших дальнейших исследований.

### Литература

- Воронин А. И., Ошеров В. И.* Динамика молекулярных реакций. М.: Наука, 1990.  
 Молекулярные постоянные неорганических соединений: Справочник / Под ред. К. С. Краснова. Л.: Химия, 1979.
- Хьюбер К.-П., Герцберг Г.* Константы двухатомных молекул. В 2 ч. М.: Мир, 1984.
- Becke A. D.* Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior // *Phys. Rev. A.* 1988. V. 38. Nr. 6. P. 3098–3100.
- Becke A. D.* Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *J. Chemical Physics.* 1993. V. 98. Nr. 7. P. 5648–5652.
- Billing G. D.* Dynamics of Molecular Surface Interactions. N. Y.: John Wiley&Sons, 2000.
- Cacciatore M., Rutigliano M., Billing G. D.* Eley-Rideal and Langmuir-Hinshelwood Recombination Coefficients for Oxygen on Silica Surfaces // *J. Thermophys. Heat Transfer.* 1999. V. 13. Nr. 2. P. 195–203.
- Fernandez E. M., Eglitis R. I., Borstel G., Balbas L. C.* Ab initio calculations of  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{O}_2$  adsorption on  $\text{Al}_2\text{O}_3$  substrates // *Comp. Mater. Sci.* 2007. V. 39. Nr. 3. P. 587–592.
- Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B.* et al. Gaussian 98. Revision A.3. Gaussian Inc. Pittsburgh. PA. 1998.
- Hariharan P. C., Pople J. A.* The Influence of Polarization Functions on Molecular Orbital Hydrogenation Energies // *Theor. Chim. Acta.* 1973. V. 28. Nr. 3. P. 213–222.
- Hohenberg P., Kohn W.* Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* 1964. V. 136. Nr. 3B. P. B864–871.

- Kohn W., Sham L.J.* Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* 1965. V. 140. Nr. 4A. P. A1133–A1138.
- Kovalev V.L., Pogosbekian M. Yu.* Investigation of heterogeneous atoms recombination by molecular dynamics method // *Proc. 25-th Intern. Symp. on Rarefield Gas Dynamics.* St-Petersburg. July 21–28, 2006.
- Kovalev V.L., Pogosbekian M. Yu.* Molecular dynamics study of elementary heterogeneous reactions applied to thermal protection system of space vehicles // *Proc. 2-nd European Conf. for Aerospace Sciences,* 2007.
- Lee C., Yang W., Parr R.G.* Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 37. Nr. 2. P. 785–789.
- Vosko S.H., Wilk L., Nusair M.* Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis // *Canadian J. Phys.* 1980. V. 58. Nr. 8. P. 1200–1211.
- Wittbrodt J.M., Hase W.L., Schlegel H.B.* Ab Initio Study of the Interaction of Water with Cluster Models of the Aluminum Terminated (0001)  $\alpha$ -Aluminum Oxide Surface // *J. Phys. Chem. B.* 1998. V. 102. Nr. 34. P. 6539–6548.

#### SIMULATION OF ADSORPTION OF OXYGEN ATOMS ON $Al_2O_3$ SURFACE BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

V.L. Kovalev<sup>1</sup>, A.A. Krupnov<sup>2</sup>, M. Yu. Pogosbekian<sup>2</sup>, L.P. Sukhanov<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Lomonosov State University Faculty of Mechanics and Mathematics*

<sup>2</sup> *Institute of Mechanics of Lomonosov State University*

<sup>3</sup> *Russian Research Centre Kurchatov Institute*

To analyze the catalytic properties of heat shield materials of space vehicles the cluster models of oxygen atom adsorption on  $Al_2O_3$  surface are constructed on the basis of density functional theory. The potential energy surface (PES) corresponding to orientational interaction of the  $O(^3P)$  atom with the  $Al_4O_6$  cluster modeling the  $\alpha$ - $Al_2O_3$  crystal surface is calculated. The performed quantum mechanical calculations permitted us to reveal a number of important PES features for subsequent description of heterogeneous catalytic processes with an application of molecular dynamics methods. In the framework of classical approach the simulation of heterogeneous recombination of oxygen atoms on the surface of  $Al_4O_6$  cluster through Eley-Rideal mechanism was carried out by molecular dynamics methods. The results of simulation showed that it is necessary to use the PES calculated with taking into account relaxation of surface monolayers and also the angular dependencies of the PES for the correct description of the process under study.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА MD-TRAJECTORY

*М. Ю. Погосбекян<sup>1</sup>, В. Л. Ковалёв<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> *Научно-исследовательский институт механики МГУ им. М. В. Ломоносова.  
E-mail: pogosbekian@imec.msu.ru*

<sup>2</sup> *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, механико-математический факультет. E-mail: kovalev@mech.math.msu.su*

С использованием вычислительного комплекса MD-Trajectory проведено моделирование динамики молекулярных реакций для исследования гетерогенной рекомбинации атомов кислорода на двух типах поверхностей — карбида кремния (SiC) и  $\beta$ -кристоболита (SiO<sub>2</sub>). Определены ключевые характеристики исследуемых процессов. Рассчитанные величины находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными и результатами расчетов других авторов. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 08-01-00230-а).

### Введение

Несмотря на то что о значительном влиянии гетерогенной рекомбинации на теплообмен при гиперзвуковых скоростях полета стало известно еще в 1950-е гг. (Goulard, 1958), проблема описания гетерогенных каталитических процессов в гиперзвуковых потоках остается актуальной и в настоящее время. По сравнению с кинетикой гомогенных реакций механизм и скорости процессов, определяющие взаимодействие газа с поверхностью, гораздо менее изучены и выражены количественно. Тем не менее понимание и контроль за этими процессами имеют решающее значение для разработки и создания теплозащитных систем, применяемых при входе космических аппаратов в атмосферу планет. Так, если отличие в тепловых потоках для различных моделей гомогенных химических реакций достигает 25 %, то тепловые потоки, полученные при различных предположениях о каталитических свойствах поверхности, различаются значительно больше. Тепловой поток к лобовой поверхности аппарата может быть снижен с использованием некаталитического покрытия в несколько раз на значительной части траектории спуска, включая область максимальных тепловых нагрузок.

В большинстве работ для описания гетерогенного катализа на поверхности космических аппаратов при их входе в атмосферу используются эмпирические кинетические модели. Они отличаются детализацией механизма гетерогенных каталитических процессов и величинами коэффициентов скоростей элементарных стадий (Ковалёв, Крупнов, 2004). Такие модели легко использовать в расчетах химически неравновесных течений у обтекаемых тел. Однако многие параметры феноменологических моделей недостаточно хорошо известны и сильно зависят от экспериментальных и теоретических данных (Ковалёв, Колесников, 2005).

В последние годы, по мере того как увеличивались возможности компьютерной техники, стали использоваться новые подходы, основанные на квантовой механике и молекулярной динамике (Воронин, Очеров, 1990; Cacciatore et al., 1999; Billing, 2000; Kovalev, Pogosbekian, 2006; Ковалёв, Погосбекян, 2006). Такие модели позволяют оценить влияние различных пространственных структур на каталитические явления, лучше понять механизм гетерогенных каталитических процессов и проанализировать каждый шаг поверхностной реакции. При этом могут быть найдены коэффициенты скоростей элементарных поверхностных процессов, распределения образующихся молекул продуктовеакции по поступательной энергии и энергии внутренних степеней свободы, энергия обмена между поверхностью и химической системой, а также реакционный механизм и путь реакций. Эта информация очень важна для оценки величины энергии передаваемой поверхности от формируемых на ней молекул.

В то время как параметры кинетических моделей обычно находятся сравнением с экспериментальными данными, при новых подходах требуется информация только об атомных числах и положении атомов внутри системы. Теоретическое описание реакций позволяет существенно уменьшить объем экспериментальной работы, необходимой для достоверного описания гетерогенного катализа.

Заметим, что из-за больших затрат вычислительных ресурсов точное решение квантово-механических уравнений является недостижимой задачей для многоатомных систем. Различные приближения при решении уравнений квантовой механики уменьшают расчетное время, однако все еще не позволяют использовать такой подход при расчетах гетерогенного катализа на теплозащитных покрытиях. Существенно уменьшает расчетное время применение моделей классической молекулярной динамики, так как в этом случае рассматриваются уравнения, описывающие лишь движение ядер в потенциальном поле, создаваемом электронной подсистемой. При сравнительно небольших вычислительных затратах могут применяться также и полуклассические модели, в которых поверхность описывается квантово-механическими уравнениями, а газ — на основе уравнений классической молекулярной динамики (Cacciatore et al., 1999; Billing, 2000).

В настоящей работе в рамках классической молекулярной динамики разработан эффективный метод исследования процессов взаимодействия газовых смесей с каталитическими поверхностями. При меньших затратах вычислительных ресурсов он позволяет получить те же величины коэффициентов рекомбинации и аккомодации химической энергии, что и полуклассический метод (Cacciatore et al., 1999). Исследуется рекомбинация атомов кислорода на поверхности  $\beta$ -кristобалита, который часто используется в теплозащитных системах космических аппаратов. Подтверждена гипотеза о том, что при возрастании энергии столкновений атомов вероятность реакции Или–Райдилла уменьшается, а вероятность адсорбции атомов увеличивается. Она объясняется тенденцией атомов при высоких энергиях столкновений с поверхностью быть

пойманными в потенциальную яму и десорбироваться в атомарном состоянии, вместо того чтобы вступить в реакцию рекомбинации и потом уже десорбироваться в составе молекулы.

## 1. ПРИБЛИЖЕНИЕ КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

### 1.1. Уравнения Гамильтона

В рамках классической молекулярной динамики атомы разбивались на две группы. Первая группа включала атомы из газовой фазы ( $i = 1, \dots, n$ ) а вторая — атомы кристаллической решетки твердого тела ( $k = 1, \dots, M$ ). Уравнения движения атомов записываются в форме Гамильтона:

$$\dot{\gamma}_i = \frac{P_{i\gamma}}{M_i};$$

$$\dot{P}_{i\gamma} = -\frac{\partial H}{\partial \gamma_i} = -\sum_{j \neq i} \frac{\partial V_{11}}{\partial R_{ij}} \frac{\partial R_{ij}}{\partial \gamma_i} - \sum_k \frac{\partial V_{12}}{\partial R_{ik}} \frac{\partial R_{ik}}{\partial \gamma_i};$$

$$\dot{\gamma}_k = \frac{P_{k\gamma}}{M_k};$$

$$\dot{P}_{k\gamma} = -\frac{\partial H}{\partial \gamma_k} = -\sum_{l \neq i} \frac{\partial V_{22}}{\partial R_{kl}} \frac{\partial R_{kl}}{\partial \gamma_k} - \sum_k \frac{\partial V_{12}}{\partial R_{ik}} \frac{\partial R_{ik}}{\partial \gamma_k};$$

$$H = \sum_{i=1}^n \sum_{\gamma=x,y,z} \frac{1}{M_i} P_{i\gamma}^2 + \sum_{k=1}^M \sum_{\gamma=x,y,z} \frac{1}{M_k} P_{k\gamma}^2 + \sum_{i < j} V_{11}(R_{ij}) + \sum_{k < l} V_{22}(R_{kl}) + \sum_{ik} V_{12}(R_{ik}),$$

где  $R_{ij} = |R_i - R_j| = \sqrt{(X_i - X_j)^2 + (Y_i - Y_j)^2 + (Z_i - Z_j)^2}$ ;  $\frac{\partial R_{ij}}{\partial \gamma_i} = -\frac{\partial R_{ij}}{\partial \gamma_j} = \frac{\gamma_i - \gamma_j}{R_{ij}}$ .

Здесь  $R_{ij}$  — расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м атомами;  $P_{i\gamma}$  — компонента  $\gamma$  импульса  $i$ -го атома в декартовых координатах ( $g = x, y, z$ ).

Первые два члена в гамильтониане  $H$  описывают кинетическую энергию газовой фазы и поверхности, а последние три — потенциальную энергию взаимодействия атомов: газовой фазы  $V_{11}$ , решетки  $V_{22}$  и газовой фазы с поверхностью  $V_{12}$ .

### 1.2. Начальные условия

Траектории движения атомов исследовались для множества заданных случайным образом начальных условий. Так, например, для представленного на рис. 1 процесса рекомбинации атомов в реакциях Или — Райдила начальные условия могут быть записаны в виде:

• Для ударяющего атома  $B$  из газовой фазы

$$X_B = R \sin \theta \cos \varphi + X_{B_s}; Y_B = R \sin \theta \sin \varphi + Y_{B_s}; Z_B = R \cos \theta;$$

$$P_X = -P_R \sin \theta \cos \varphi; P_Y = -P_R \sin \theta \sin \varphi; P_Z = -P_R \cos \theta,$$

где  $P_R = \sqrt{2M_B E_{coll}}$ . Здесь  $\theta$ ,  $\varphi$  — углы, случайным образом равномерно распределенные в интервале  $(0, \pi/2)$  и  $(0, 2\pi)$  соответственно;  $M_B$  — масса атома  $B$ ;  $R_B$  фиксирована и выбрана настолько большой, что начальным взаимодействием атома  $B$  с поверхностной решеткой можно пренебречь;  $E_{coll}$  — относительная энергия столкновений между атомом  $B$  и решеткой.

• Для адсорбированного атома  $A$

$X_{A_s}$ ,  $Y_{A_s}$  случайным образом распределены на поверхности;  $P_X$ ,  $P_Y$ ,  $P_Z$  вычисляются так же, как и для атома  $B$ , но  $P_R = \sqrt{2M_A k_B T_s}$ , где  $M_A$  — масса атома  $A$ ;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $T_s$  — температура поверхности.

• Для атомов кристаллической решетки

$$R_{k\gamma} = R_{k\gamma}^0 + \sqrt{2k_B T_s / F_k} \cos(\varphi_{k\gamma}^0); P_{k\gamma} = \sqrt{2M_k k_B T_s / F_k} \sin(\varphi_{k\gamma}^0),$$

где  $R_{k\gamma}^0$  — равновесное расстояние;  $F_k$  — силовая постоянная для  $k$ -й моды;  $\varphi_{k\gamma}^0$  — фазовый угол, равномерно распределенный в интервале  $(0, 2\pi)$ ;  $M_k$  — масса  $k$ -го атома.

Траекторные вычисления заканчивались при выполнении следующих условий:

•  $Z_A + Z_B > R_{max}$ ; это означало, что по крайней мере один из атомов покидает поверхность;

•  $Z_A + Z_B < R_{min}$  при  $\tau_{calc} > \tau_{max}$  — при этом условии оба атома длительное время  $\tau_{calc}$  находятся вблизи поверхности.

Здесь  $R_{min}$ ,  $R_{max}$ ,  $\tau_{max}$  — заданные величины.

В случае когда оба атома покидают поверхность, проверялись состояния, в которых находится атомная пара  $AB$ . Если пара  $AB$  оказывалась в связанном или квазисвязанном состоянии, то с помощью специальной итерационной про-

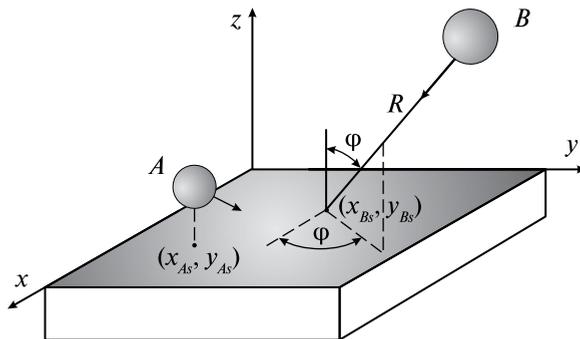


Рис. 1. Схема ударного механизма рекомбинации Или-Райдила

цедуры определялись колебательные  $\nu$  и вращательные  $j$  числа такой молекулы. Такая процедура подробно описана в (Воронин, Очеров, 1990).

При фиксированных температуре поверхности  $T_s$  и энергии столкновений  $E_{coll}$  варьировались остальные параметры, случайно распределенные в соответствующих интервалах. Зависимости ключевых характеристик гетерогенной рекомбинации  $\gamma(T_s, E_{coll})$  и  $\beta(T_s, E_{coll})$  от  $T_s$  и  $E_{coll}$  находились в результате усреднения результатов по варьируемым параметрам. Для получения достаточно точных результатов требовался расчет большого числа траекторий.

### 1.3. Численный метод

Расчеты гетерогенных каталитических процессов на основе молекулярной динамики требуют больших вычислительных ресурсов. В работе использовались кластерные системы высокой производительности и MPI-технология для распараллеливания вычислений. Комплекс MD-Trajectory, разработанный ранее для исследования химических процессов в газовой фазе (Погосбекян, Лосев, 2003), был развит для изучения гетерогенных каталитических процессов (Ковалёв, Погосбекян, 2007). Он показал высокую эффективность при тестировании на суперкомпьютерных кластерах МГУ им. М. В. Ломоносова и Российской академии наук.

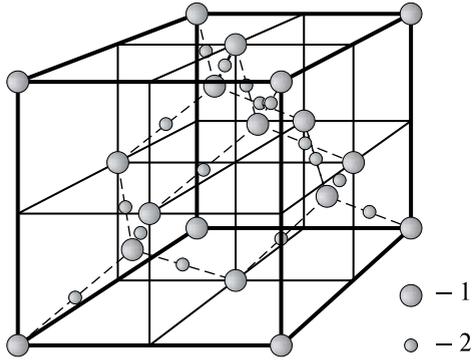
## 2. ИССЛЕДОВАНИЕ УДАРНОГО МЕХАНИЗМА РЕКОМБИНАЦИИ АТОМОВ КИСЛОРОДА НА Si-СОДЕРЖАЩИХ ПОВЕРХНОСТЯХ

При моделировании входа космического аппарата в плотные слои атмосферы Земли ключевыми на поверхности теплозащитного покрытия являются гетерогенные реакции рекомбинации атомов кислорода и азота. Много экспериментальных работ по исследованию этих процессов на различных типах Si-содержащих поверхностей (карбид кремния SiC,  $\beta$ -кристоболит SiO<sub>2</sub> и др.) проведено на плазмотронах. В ходе этих экспериментов измерялась эффективная интегральная характеристика  $\gamma\beta$  (Ковалёв, Колесников, 2005; Pidan et al., 2005). Другие экспериментальные работы на установке MESOX (Balat-Pichelin et al., 2003; Balat-Pichelin et al., 2005) позволяют разделить эти характеристики и получить отдельно коэффициенты рекомбинации  $\gamma$  и аккомодации  $\beta$ .

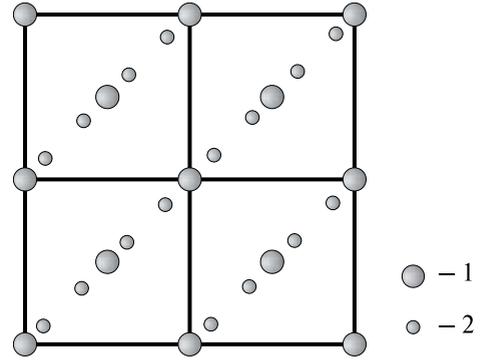
### 2.1. Рекомбинация кислорода на поверхности $\beta$ -кристоболита

В рамках классического приближения молекулярной динамики проведены вычисления коэффициентов  $\gamma$  и  $\beta$  при рекомбинации атомов кислорода на поверхности  $\beta$ -кристоболита — одного из видов кварца, часто используемого в теплозащитных системах космических аппаратов.

Элементарная ячейка кристаллической решетки  $\beta$ -кристоболита имеет достаточно сложную структуру, включающую девять слоев (рис. 2 — Wyckoff, 1924). При численном моделировании рассматривалась поверхность размерностью



**Рис. 2.** Элементарная ячейка кристаллической решетки  $\beta$ -квartzита: 1 — атомы Si; 2 — атомы O



**Рис. 3.** Структура двух верхних слоев поверхности  $\beta$ -квartzита; на верхнем слое находятся атомы Si (1), на втором слое — атомы O (2)

$2 \times 2$  единичные ячейки, с заданными периодическими граничными условиями, моделирующими бесконечную поверхность. Исследовалась поверхность с атомами Si на верхнем слое (рис. 3, поверхность B из (Cacciatore et al., 1999)). Расчеты проводились при фиксированной температуре поверхности  $T_s = 1000$  К, которая характерна для теплозащитных покрытий при входе космических аппаратов в атмосферу.

Слагаемые  $V_{11}$  и  $V_{12}$  потенциальной энергии для исследуемой системы были взяты из работы (Cacciatore et al., 1999):

$$V_{22}(R_1, R_2, R_3, \dots, R_N) = \sum_{i < j} V_2(R_i, R_j) + \sum_{i < j < k} V_3(R_i, R_j, R_k),$$

где слагаемые  $V_2$  выражались в виде модифицированного потенциала Борна — Майера:

$$V_2(R_i, R_j) = V_2(R_{ij}) = A_{ij} \exp(-R_{ij}/\rho) + (Z_i Z_j e^2 / R_{ij}) \operatorname{erfc}(R_{ij}/\beta_{ij}),$$

$$A_{ij} = (1 + Z_i/n_i + Z_j/n_j) b \exp((\sigma_i + \sigma_j)/\rho), \quad b = \text{const.}$$

Здесь  $Z_i$  — заряд иона;  $\rho, \beta_{ij}$  — подгоночные параметры;  $n_i$  — число валентных электронов. Отметим, что поверхность потенциальной энергии учитывает потенциалы взаимодействия не только парные, но и трехатомные, учитывающие изменение угла между связями (Feuston, Garofalini, 1988):

$$V_3(R_i, R_j, R_k) = h(R_{ij}, R_{ik}, \theta_{jik}) + h(R_{jk}, R_{ji}, \theta_{kji}) + h(R_{ki}, R_{kj}, \theta_{ikj}).$$

Считалось, что функции  $h$  принимают ненулевые значения:

$$h(R_{ij}, R_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda_i \exp\left[\gamma_i / (R_{ij} - R_i^c) + \gamma_i / (R_{ik} - R_i^c)\right] (\cos \theta_{jik} - \cos \theta_{jik}^c)$$

только при  $R_{ij} < R_i^c$  и  $R_{ik} < R_i^c$ , здесь  $\lambda_i, \gamma_i, R_i^c, \cos \theta_{jik}^c$  — постоянные,  $\theta_{jik}$  — угол между связями  $R_{ij}$  и  $R_{ik}$ .

Параметры модифицированного потенциала Борна – Майера и трехатомного потенциала взаимодействия приведены в табл. 1 и 2 соответственно.

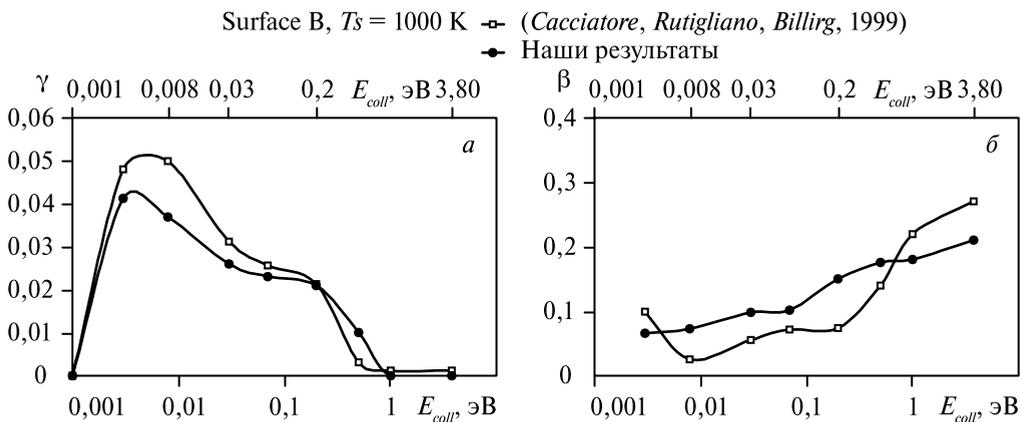
**Таблица 1.** Параметры модифицированного потенциала Борна – Майера

$X-Y$	$A_{X-Y}, \text{эВ}$	$\beta_{X-Y}, \text{Е}$
Si-O	1847	2,60
O-O	449	2,55
Si-Si	1173	2,53

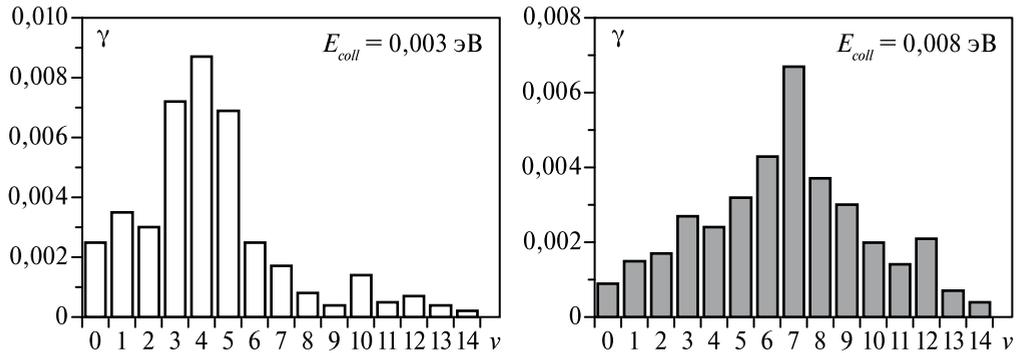
**Таблица 2.** Параметры взаимодействия трех атомов

$X$	$\lambda_X, \text{эВ}$	$\gamma_X, \text{Е}$	$R_X^c, \text{Е}$	$\cos \theta_X^c$
Si	112,0	2,6	3,0	
O	2,0	2,0	2,6	
O-Si-O				-1/3
Si-O-Si				-1/3

Коэффициенты рекомбинации и аккомодации энергии рекомбинации были определены на основе расчета более чем 100 000 траекторий в широком диапазоне изменения величины энергии столкновений атомов с кристаллической решеткой  $E_{coll}$  при заданной температуре поверхности  $T_s = 1000 \text{ К}$ . Расчеты показали, что коэффициент рекомбинации атомов кислорода в реакции Или – Райдила монотонно убывает с увеличением  $E_{coll}$  и при  $E_{coll} \cong 1 \text{ эВ}$  становится равным нулю. Однако для коэффициента аккомодации химической энергии ситуации обратная: чем больше  $E_{coll}$ , тем большая доля энергии рекомбинации передается поверхности. Рассчитанные величины  $\gamma$  и  $\beta$  (рис. 4) хорошо согласуются с величинами этих коэффициентов, полученных в (Cacciatore et al., 1999).



**Рис. 4** Коэффициент рекомбинации (а) и коэффициент аккомодации (б) химической энергии для реакции рекомбинации Или – Райдила  $\text{O} + \text{Os} \rightarrow \text{O}_2$



**Рис. 5.** Распределение колебательной энергии в сформированных в реакции Или–Райдила молекулах  $O_2$  на поверхности  $\beta$ -кристобалита для различных значений энергии столкновений  $E_{coll}$

Для сравнения с приведенными в (*Pichelin et al.*, 2004; *Бала-Пишлен* и др., 2006) экспериментальными данными было проведено усреднение  $\gamma(T_s, E_{coll})$  и по энергии столкновений атомов кислорода с поверхностью  $E_{coll}$  в предположении, что реализуется ее максвелловское распределение. Температура газа  $T_g$  считалась равной температуре поверхности  $T_s$ . Результаты, представленные в табл. 3, показывают, что полученная величина  $\gamma$  достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными, приведенными (*Pichelin et al.*, 2004; *Бала-Пишлен* и др., 2006) для трех образцов  $\beta$ -кристобалита, а также с рассчитанной величиной  $\gamma$  (*Cacciatore et al.*, 1999), где при нахождении свойств поверхности использовалось квантово-механическое описание. Полученная величина коэффициента аккомодации энергии рекомбинации  $\beta = 0,127$  хорошо согласуется с результатами расчетов (*Cacciatore et al.*, 1999) (рис. 5).

**Таблица 3.** Коэффициент гетерогенной рекомбинации  $\gamma$  атомов O на поверхности  $\beta$ -кристобалита. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными

	$\gamma$	$T, \text{ К}$
Эксперимент ( <i>Pichelin et al.</i> , 2004), образец 1	0,0255	1008
Эксперимент ( <i>Pichelin et al.</i> , 2004), образец 1	0,0296	1005
Эксперимент ( <i>Pichelin et al.</i> , 2004), образец 1	0,0255	1017
Расчет в работе ( <i>Cacciatore et al.</i> , 1999)	0,029	1000
Расчет в данной работе	0,026	1000

Расчеты также показали, что при возрастании энергии столкновений атомов вероятность реакции Или–Райдила уменьшается, а вероятность адсорбции атомов увеличивается. При высоких энергиях столкновений атомов с поверхностью для атомов наблюдается благоприятная тенденция быть пойманными в потенциальную яму и десорбироваться в атомарном состоянии, вместо того чтобы вступить в реакцию рекомбинации и потом уже десорбироваться в составе молекулы.

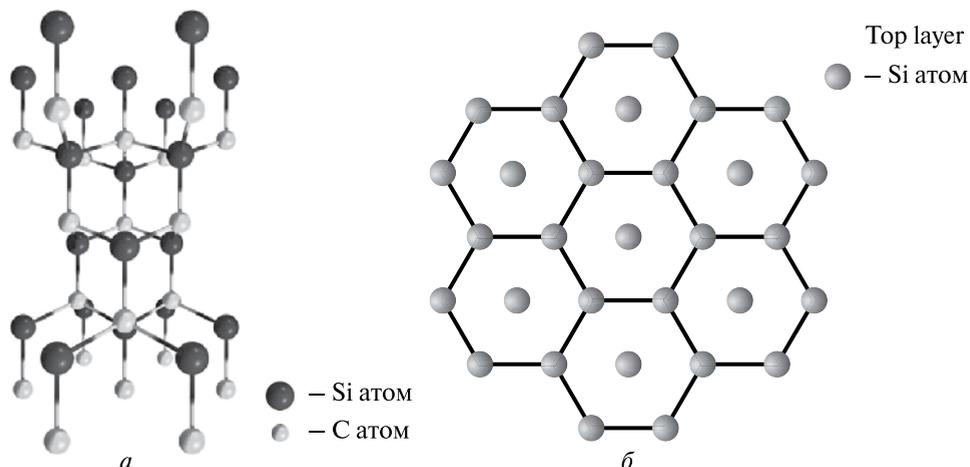


Рис. 6. Фрагмент кристаллической матрицы 3C-SiC (а); структура верхнего слоя поверхности 3C-SiC (б)

## 2.2. Рекомбинация кислорода на поверхности карбида кремния SiC

При исследовании силицированного карбида 3C-SiC, фрагмент кристаллической матрицы которого показан на рис. 6а, также рассматривалась поверхность с атомами Si на верхнем слое — рис. 6б. Поверхность потенциальной энергии была взята из (Tersoff, 1989).

Сравнение полученных результатов для исследованных материалов проведено на рис. 7. Там же приведена величина коэффициента рекомбинации для металлокерамического силицированного карбида SSiC (черный квадратик на рис. 7а), полученная в экспериментах (Pidan et al., 2005). Видно, что при малых

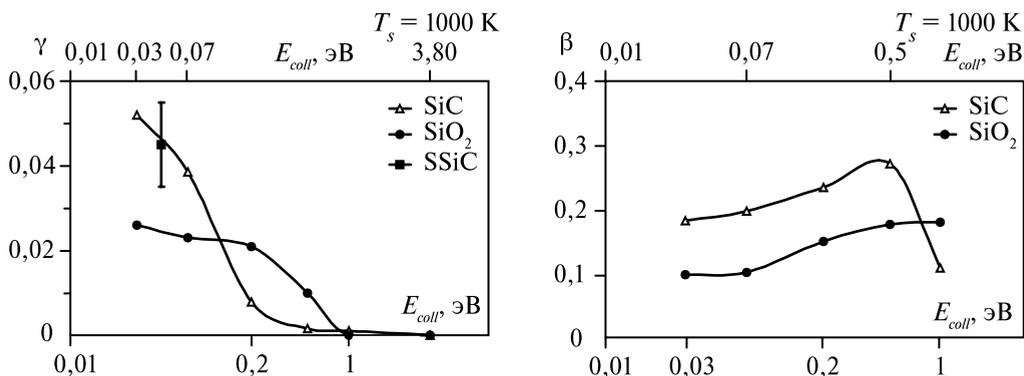
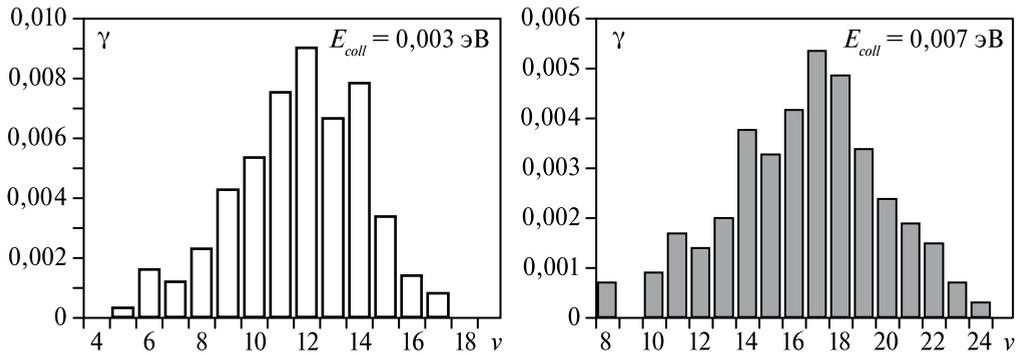


Рис. 7. Сравнение результатов расчетов для реакции рекомбинации Или–Райдила  $O + O_s \rightarrow O_2$  для двух типов поверхностей: а — коэффициенты рекомбинации атомов; б — коэффициенты аккомодации энергии рекомбинации



**Рис. 8.** Распределение колебательной энергии сформированных в реакции Или–Райдилла молекул  $O_2$  на поверхности SiC для различных значений энергии столкновений  $E_{coll}$

энергиях столкновений атомов с поверхностью  $E_{coll} < 0,04$  эВ процесс рекомбинации более эффективен на поверхности SiC, чем на  $SiO_2$ . Однако при более высоких энергиях ситуация меняется. Тем не менее за счет рекомбинации атомов кислорода поверхность SiC будет нагреваться сильнее, чем  $SiO_2$ , так как коэффициент аккомодации химической энергии для SiC выше, чем для  $SiO_2$  во всем диапазоне изменения  $E_{coll}$  (см. рис. 7б).

Распределение колебательной энергии сформированных в реакции Или–Райдилла молекул  $O_2$  на поверхности SiC, так же как и на поверхности  $SiO_2$ , имеет максимум, и этот максимум смещается в область больших значений частоты колебаний с ростом  $E_{coll}$  (рис. 8).

### Заключение

На основе молекулярно-динамических расчетов, проведенных в рамках вычислительного комплекса MD-Trajectory, дан анализ каталитических свойств силиконизированных материалов  $SiO_2$  и SiC, использующихся для теплозащиты космических аппаратов. Найдены величины коэффициентов рекомбинации и аккомодации химической энергии, распределения колебательной энергии сформированных в процессе рекомбинации молекул  $O_2$ . Рассчитанные величины вероятности рекомбинации атомов кислорода на поверхности  $\beta$ -кристаллита в реакции Или–Райдилла и коэффициента аккомодации энергии рекомбинации хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными и расчетами другим методом.

Обнаружено, что при малых энергиях столкновений атомов с поверхностью  $E_{coll}$  процесс рекомбинации более эффективен на поверхности SiC, чем на  $SiO_2$ . Однако при более высоких энергиях ситуация меняется. Тем не менее за счет рекомбинации атомов кислорода поверхность SiC будет нагреваться сильнее, чем  $SiO_2$ , так как коэффициент аккомодации химической энергии для SiC выше, чем для  $SiO_2$ , во всем диапазоне изменения  $E_{coll}$ .

## Литература

- Афонина Н. Е., Громов В. Г., Ковалёв В. Л.* Моделирование каталитических свойств покрытий высокотемпературных теплозащитных материалов в диссоциированной смеси углекислого газа и азота // Изв. РАН. МЖГ. 2000. № 1. С. 106–116.
- Бала-Пишлен М., Ковалёв В. Л., Колесников А. Ф., Крупнов А. А.* Экспериментальное и теоретическое моделирование неполной аккомодации энергии гетерогенной рекомбинации в диффузионно-калориметрической установке // Вестн. МГУ. Сер. 1. Математика, механика. 2006. № 3. С. 32–38.
- Беркут В. Д., Дорошенко В. М., Ковтун В. В., Кудрявцев Н. Н.* Неравновесные физико-химические процессы в гиперзвуковой аэродинамике. М.: Энергоатомиздат, 1994.
- Воронин А. И., Очеров В. И.* Динамика молекулярных реакций. М.: Наука. 1990.
- Ковалёв В. Л.* Гетерогенные каталитические процессы в аэротермодинамике. М.: Физматлит, 2002.
- Ковалёв В. Л., Колесников А. Ф.* Экспериментальное и теоретическое моделирование гетерогенного катализа в аэротермохимии // Изв. РАН. МЖГ. 2005. № 5. С. 3–31.
- Ковалёв В. Л., Колесников А. Ф., Крупнов А. А., Якушин М. И.* Анализ феноменологических моделей, описывающих каталитические свойства высокотемпературных многоразовых покрытий // Изв. РАН. МЖГ. 1996. № 6. С. 133–144.
- Ковалёв В. Л., Крупнов А. А.* Влияние образования оксида азота в гетерогенных каталитических реакциях на тепловые потоки к поверхности многоразовых космических аппаратов // Вестн. МГУ. Сер. 1. Математика, механика. 2004. № 1. С. 31–36.
- Ковалёв В. Л., Погосбекян М. Ю.* Моделирование гетерогенной рекомбинации методами молекулярной динамики на многопроцессорных кластерах // Международ. семинар «Супервычисления и математическое моделирование». Рос. федер. ядерный центр — Всерос. НИИ эксперимент. физики. Саров, 2006. С. 66–67.
- Ковалёв В. Л., Погосбекян М. Ю.* Моделирование гетерогенной рекомбинации атомов на теплозащитных покрытиях космических аппаратов методами молекулярной динамики // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 2007. № 4. С. 176–183.
- Погосбекян М. Ю., Лосев С. А.* Исследование реакции  $\text{CO} + \text{N} \rightarrow \text{CN} + \text{O}$  методом квазиклассических траекторий с использованием вычислительного комплекса MD-Trajectory // Хим. физика. 2003. Т. 22. № 6. С. 38–46.
- Balat-Pichelin M., Badie J. M., Berjoan R., Boubert P.* Recombination coefficient of atomic oxygen on ceramic materials under earth re-entry conditions by optical emission spectroscopy // Chemical Physics. 2003. V. 291. P. 181–194.
- Balat-Pichelin M., Kolesnikov A. F., Kovalev V. L., Krupnov A. A.* Experimental and theoretical predicting of the efficiency of atomic oxygen recombination and chemical

- energy accommodation on space vehicles coatings // Proc. European Conf. for Aerospace Sciences (EUCASS), CD EUCASS, 2.01.04, 2005.
- Billing G. D.* Dynamics of Molecular Surface Interactions. N. Y.: Wiley, 2000. 235 p.
- Cacciatore M., Rutigliano M., Billing G. D.* Eley-Rideal and Langmuir-Hinshelwood recombination coefficients for oxygen on silica surfaces // J. Thermophys and Heat Transfer. 1999. V. 13. Nr. 2. P. 195–203.
- Feuston B. P., Garofalini S. H.* Empirical three-body for vitreous silica // J. Chemical Physics. 1988. V. 89. Nr. 9. P. 5818–5824.
- Goulard R.* On catalytic recombination rates in hypersonic stagnation heat transfer // Jet Propuls. 1958. V. 28. Nr. 11. P. 737–745.
- Kovalev V. L., Pogosbekian M. Ju.* Investigation of heterogeneous atoms recombination by molecular dynamics method // Proc. 25th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. St-Petersburg, 2006.
- Pichelin M., Kovalev V. L., Kolesnikov A. F.* Modeling the surface catalysis of high-temperature reusable thermal insulation and heat transfer of space vehicles entering the Earth and Martian atmospheres // Trans. French-Russian A. M. Liapunov Institute for Applied Mathematics and Computer Science. 2004. V. 4. P. 86–99.
- Pidan S. P., Auweter-Kurtz M., Herdrich G., Fertig M.* Recombination Coefficients and Spectral Emissivity of Silicon Carbide-Based Thermal Protection Materials // J. Thermophysics and Heat Transfer. 2005. V. 19. P. 566–577.
- Tersoff J.* Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // Physical Rev. B. 1989. V. 39. P. 5566–5568.
- Wyckoff R. W. G.* The crystal structure of the high temperature form of cristobalite ( $\text{SiO}_2$ ) // Amer. J. Sci. 1925. Ser. 5. V. 9. Nr. 54. P. 448–459.

## MODELING OF HETEROGENEOUS CATALYTIC PROCESSES USING MD-TRAJECTORY SOFTWARE COMPLEX

**M. Ju. Pogosbekian<sup>1</sup>, V. L. Kovalev<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Institute of Mechanics Lomonosov State University*

<sup>2</sup> *Lomonosov State University Faculty of Mechanics and Mathematics*

Modeling of molecular reaction dynamics using MD-Trajectory software complex for study of heterogeneous recombination of oxygen atoms on the two types of surfaces silicon carbide (SiC) and  $\beta$ -cristobalite ( $\text{SiO}_2$ ) were performed. The key characteristics of investigated processes were determined. Calculated values are in good agreement with available experimental data and calculated results of other authors.

## МЕТОД КРУПНЫХ ВИХРЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КОСМИЧЕСКОЙ И АСТРОФИЗИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ

**А. А. Чернышов, К. В. Карельский, А. С. Петросян**

*Институт космических исследований Российской академии наук  
E-mail: [achernyшов@iki.rssi.ru](mailto:achernyшов@iki.rssi.ru); [kkarelsk@iki.rssi.ru](mailto:kkarelsk@iki.rssi.ru); [apetroсян@iki.rssi.ru](mailto:apetroсян@iki.rssi.ru)*

В данной работе впервые применен метод крупных вихрей (Large Eddy Simulation — LES) для изучения сжимаемой магнитогиродинамической (МГД) турбулентности, получены отфильтрованные уравнения МГД с использованием процедуры средневзвешенной фильтрации (фильтрация по Фавру). Разработаны различные модели замыкания для подсеточных членов, возникающих после фильтрации исходных уравнений сжимаемой МГД, а именно: модель Смагоринского для МГД-случая; модель Колмогорова; модель, основанная на перекрестной спиральности скорости и магнитного поля; модель подобия масштабов для МГД-турбулентности и смешанная модель. Для оценки эффективности различных предложенных подсеточных замыканий LES использовались результаты, полученные прямым численным моделированием МГД-турбулентности в различных диапазонах магнитного числа Рейнольдса, гидродинамического числа Рейнольдса и числа Маха. Сравнение между LES и прямым численным моделированием выполнено для временной эволюции кинетической и магнитной энергии, перекрестной спиральности, подсеточной и молекулярной диссипации кинетической и магнитной энергии, для спектров энергий, а также для временной динамики турбулентной напряженности, пологости, асимметрии скорости и магнитного поля. Приведены результаты расчетов сжимаемых МГД-течений методом LES с использованием пяти подсеточных параметризаций. Было показано, что некоторые предложенные в работе модели замыкания обеспечивают достаточную диссипацию кинетической и магнитной энергии, уменьшают численные затраты и обеспечивают адекватные результаты при моделировании сжимаемой МГД-турбулентности при различных числах подобия. Также, используя преимущества разработанного метода крупных вихрей, исследуется нетривиальный режим сжимаемой МГД-турбулентности локального межзвездного газа, когда исходно сверхзвуковые флуктуации переходят в слабосжимаемый режим. Показано, что имеется возможность существования режима слабосжимаемых турбулентных пульсаций, когда флуктуации плотности являются пассивным скаляром. Численные результаты используются для изучения спектров кинетической энергии и флуктуаций плотности, динамики замагниченности плазмы, анизотропных свойств флуктуаций магнитоплазмы в локальной межзвездной среде.

### Введение

Сжимаемая магнитогиродинамическая (МГД) турбулентность является широко распространенным состоянием космической плазмы во многих астрофизических, гелиофизических, геофизических процессах. Например, в аккреционных дисках МГД-турбулентность вызвана магниторотационной неустойчивостью. Формирование звездных облаков вследствие эффектов магнитного

поля и гравитации происходит в турбулентных условиях. Динамика межзвездной и межпланетной среды также имеет турбулентный характер. Большинство турбулентных явлений в физике Солнца описываются в рамках МГД: солнечный ветер, расширение солнечной короны, конвективная зона, фотосфера, солнечный тахоклон. Явления турбулентности наблюдаются в околоземном пространстве как в солнечном ветре, так и в различных областях магнитосферы Земли, в частности, в дальней области геомагнитного хвоста наблюдаемые спутниками свойства космической плазмы адекватно можно объяснить только в рамках теории и моделей турбулентности. Магнитогидродинамическая турбулентность — важный процесс при возникновении динамопроцессов и генерации магнитного поля в космических условиях. Турбулентные течения в магнитном поле также широко распространены и в прикладных областях. Среди инженерных применений можно указать возможность управления пограничным слоем и снижение сопротивления потоку, магнитогидродинамические течения в каналах, в процессах отливки стали и в трубах для охлаждения термоядерных реакторов.

Возникновение турбулентности связано с неустойчивостью исходного состояния космической плазмы. Вследствие неустойчивости амплитуда колебаний в электропроводящей жидкости нарастает до нелинейного уровня, при котором становятся существенными сложные процессы взаимодействия и взаимной трансформации колебаний. Как известно, при больших скоростях потока, т. е. при больших числах Рейнольдса (характеризует отношение сил инерции к вязким силам), течение становится неустойчивым и разбивается на крупномасштабные вихри. Нелинейное взаимодействие между вихрями приводит к непрерывному дроблению их масштабов, происходящему вплоть до малых масштабов, для которых существенно затухание, обусловленное молекулярной вязкостью. Дробление масштабов вихрей соответствует перекачке энергии турбулентных движений из длинноволновой в коротковолновую область спектра. В результате в потоке появляются беспорядочные вихри разных размеров, и скорость потока в каждой точке меняется случайным образом. Кроме того, важнейшей особенностью турбулентности в космических условиях является наличие в ней случайных магнитных полей наряду со случайными значениями скорости. Для таких течений существенную роль играют эффекты нелинейности, вязкости, диффузии, сжимаемости, турбулентность является трехмерной, поэтому численное моделирование сжимаемой МГД представляет собой важный инструмент для исследования заряженной жидкости в таких МГД-течениях. К тому же плазма в космических условиях, как правило, недоступна для непосредственного экспериментального изучения.

Наиболее подробную информацию о турбулентном течении жидкости можно получить с помощью прямого численного моделирования — DNS (Direct numerical simulation), которое заключается в численном решении полной нестационарной системы магнитогидродинамических уравнений. При таком подходе разрешаются все масштабы движения заряженной жидкости. Метод DNS не требует специальных замыканий для уравнений магнитной ги-

дродинамики. Прямой численный расчет МГД-турбулентности сталкивается с принципиальными трудностями, связанными с большими гидродинамическими и магнитными числами Рейнольдса, которые характерны для исследуемых процессов, так как в этом случае число степеней свободы турбулентного движения велико и минимальное количество узлов на численной сетке должно быть столь большим, что ограничивает применение прямого численного моделирования для изучения турбулентных течений с реальными характерными числами Рейнольдса.

Осборн Рейнольдс предложил статистический подход для исследования турбулентных течений (*Reynolds*, 1895), который заключается в осреднении уравнений движения — RANS (Reynolds averaged Navier–Stokes). В методе RANS все параметры движения разлагаются на среднюю и турбулентную составляющие. В уравнении Навье–Стокса появляются рейнольдсовские напряжения, которые необходимо замкнуть. Следовательно, вся турбулентность моделируется (например,  $k - \epsilon$  модель), а не рассчитывается, как в методе DNS. Метод RANS обычно используется для теоретических исследований средних течений. Этот подход не содержит информации о динамике турбулентности.

Метод крупных вихрей LES (Large eddy simulation) описывает приближенную динамику турбулентности, где крупномасштабная часть турбулентного потока рассчитывается непосредственно, а мелкомасштабная — моделируется, т. е. LES является промежуточным подходом к изучению турбулентности между DNS и RANS.

В методе LES используется операция фильтрации для разложения характеристик турбулентного движения на крупномасштабную и мелкомасштабную части, что связано с достаточной изотропностью, однородностью и универсальностью мелких масштабов турбулентного движения. Мелкомасштабное движение исключается из исходной системы уравнений движения с применением процедуры фильтрации, и дальше их влияние на движение моделируется с использованием подсеточных моделей SGS (subgrid scale) (или другое название SFS (subfilter scale)), выраженных через отфильтрованные параметры турбулентных течений. Крупномасштабное движение рассчитывается из решения отфильтрованных нестационарных уравнений магнитной гидродинамики. LES является методом для моделирования течений с большими числами Рейнольдса, так как в методе крупных вихрей предполагается, что энергия переносится от больших масштабов к малым только внутри инерционного интервала, поэтому число степеней свободы будет меньше, чем в методе DNS, следовательно, LES требует значительно меньших вычислительных затрат по сравнению с DNS.

Изначально метод крупных вихрей развивался для моделирования гидродинамической турбулентности нейтральной жидкости. Значительное количество работ посвящено моделированию именно гидродинамических несжимаемых течений, в то время как к сжимаемому течению метод LES применялся гораздо реже, так как в этом случае появляются дополнительные слагаемые в уравнениях, которые необходимо параметризовать. Впервые LES рассматривался

и использовался к сжимаемой жидкости в работе (*Speziale et al.*, 1988). Среди ранних работ стоит выделить (*Erlebacher et al.*, 1992), где авторы обобщили замыкания на случай сжимаемости и провели анализ и сравнения результатов LES для сжимаемого течения с DNS. Подробная информация о различных подсеточных моделях метода крупных вихрей для случая сжимаемого газа содержится в работе (*Martin et al.*, 2000). В этой статье авторы рассматривают параметризации для различных видов уравнений энергии: внутренней энергии, энтальпии и полной энергии. Для сжимаемых магнитогидродинамических турбулентных течений метод LES не применялся, все предыдущие работы в этом направлении ограничивались только рассмотрением несжимаемой жидкости. В работах (*Müller, Carati*, 2002; *Zhou, Vahala*, 1991) авторы использовали LES к изучению несжимаемого МГД турбулентного движения. В своей работе они предложили новые и расширили гидродинамические замыкания для магнитогидродинамических подсеточных слагаемых. В работе (*Кнаепен, Мойн*, 2003) рассматривалось влияние магнитного поля в методе LES на течение проводящей жидкости при малых значениях магнитного числа Рейнольдса без учета уравнения магнитной индукции.

Вообще, полные нелинейные трехмерные уравнения магнитной гидродинамики (включая диссипативные, тепловые, диффузионные и сжимаемые эффекты) столь сложны, что поддаются лишь приближенному численному решению. Однако из-за того, что для космических МГД-течений характерны большие числа Рейнольдса и числа Маха отличны от нуля, моделирование сжимаемой МГД-турбулентности ограничено вычислительными ресурсами и встречается намного реже, чем для несжимаемых сред. Поэтому зачастую пользуются упрощенными моделями, пренебрегая некоторыми эффектами. Например, моделированием идеальных МГД-течений, когда пренебрегают диссипацией и теплопроводностью и считают, что проводимость плазмы бесконечна (*Balsara*, 2001). В этом случае система МГД-уравнений становится гиперболической, а не параболической, как для диссипативной системы уравнений, что упрощает численные решения, так как можно использовать хорошо развитые годуновские схемы различного порядка точности (в результате решение трехмерной задачи сводится к решению серии одномерных задач, численные потоки в каждом пространственном направлении вычисляются на основе соответствующей одномерной задачи Римана о распаде произвольного разрыва. Существует несколько работ, где используют TVD-схемы, ENO/WENO-схемы, схемы на основе принципа минимального значения производной и т. д. для решения уравнений вязкого сжимаемого газа для МГД-случая (*Ustyugov, Andrianov*, 2002) путем добавления численных вязких потоков к соответствующим невязким потокам, однако это часто нарушает монотонность разностной схемы и может привести к некорректным результатам, обычно подобного рода реконструкции используются для невязкой жидкости. Иногда используют квазиупругое приближение (anelastic approximation) (*Gilman, Glatzmaier*, 1981) для МГД-моделирования, когда предполагается, что звуковые моды отсутствуют или стационарны, однако такого рода приближение используется в основном только при моделировании

конвективных зон Солнца и звезд. Часто межзвездную и межпланетную среду, а также солнечный и звездный ветер рассматривают, предполагая политропное (или адиабатическое) соотношение между плотностью и давлением для замыкания системы уравнений, в этом случае соображения о температуре процесса не являются основными, и система сжимаемых МГД-уравнений решается без уравнения энергии (*Goldstein et al.*, 1995; *Elmegreen, Scalo*, 2004; *Brandenburg*, 2003; *Shaikh, Zank*, 2007). Еще одним упрощением является рассмотрение сжимаемой двухмерной МГД-турбулентности (*Picone, Dahlburg*, 1991; *Dahlburg, Picone*, 1989; *Ladeinde, Gaitonde*, 2004), причем в работах (*Picone, Dahlburg*, 1991; *Dahlburg, Picone*, 1989) в качестве начальных условий для скорости и магнитного поля использовалось детерминированное, неслучайное распределение (так называемый вихрь Орсага – Танга (*Orszag, Tang*, 1979)), однако случайное распределение начальных значений скорости и магнитного поля является более подходящим условием для космических применений в МГД-моделировании. Подробное влияние магнитного числа Рейнольдса на двумерное магнитогидродинамическое течение при различных начальных условиях описывается в работе (*Ladeinde, Gaitonde*, 2004). Двухмерная МГД-турбулентность существенно отличается от трехмерной турбулентности, так как в двухмерном потоке (если пренебречь вязкостью) сохраняется средняя завихренность, в то время как в трехмерном вихревые трубки деформируются и завихренность не является инвариантом движения, также турбулентные динамопроцессы и генерация крупномасштабного магнитного поля возможны только в трехмерном случае МГД-турбулентности (*Ландау, Лифшиц*, 2005). Иногда при вычислении космических течений предполагают, что плазменная бета (отношение давления плазмы к энергии магнитного поля) столь велика, что пренебрегают магнитным полем, задача сводится к гидродинамической и решается система уравнений для движения нейтральной жидкости (*Dastgeer, Zank*, 2004, 2005).

Исследование сжимаемой турбулентности как в гидродинамике нейтральной жидкости, так и в магнитогидродинамике представляется трудной задачей, поскольку не существует аналитической или приближенной теории таких явлений. Однако, несмотря на существенную роль сжимаемости в космической плазме, целый ряд наблюдений показывает воспроизведение колмогоровского спектра флуктуаций плотности (*Armstrong et al.*, 1995; *Spangler*, 2001). Для интерпретации таких наблюдений была предложена теория «почти несжимаемой» (nearly incompressible) среды, которая описывает флуктуации плотности в гидродинамике нейтрального (*Zank, Matthaeus*, 1991) и магнитного (*Zank, Matthaeus*, 1993) газа в режиме переноса пассивного скаляра. В работе (*Dastgeer, Zank*, 2005) аналитическая теория для сжимаемого нейтрального газа была подтверждена прямым численным моделированием только для двухмерного случая. В работе (*Shaikh, Zank*, 2007) прямым численным моделированием было показано, что в сжимаемой магнитогидродинамике существует аналогичный эффект уменьшения локального турбулентного числа Маха со сверхзвукового режима в дозвуковой, что соответствует режиму преобразования сверхзвуковых турбулентных флуктуаций в дозвуковые. Однако в этой работе в силу

ограничений метода прямого численного моделирования не удалось получить спектры плотности и кинетической энергии и показать их совпадения и реализацию пассивного режима для плотности в сжимаемой МГД-турбулентности. Несмотря на это, авторы данной работы (*Shaikh, Zank, 2007*) используют эти результаты для интерпретации спутниковых данных о солнечном ветре и локальной межзвездной среде.

В настоящей работе впервые метод крупных вихрей обобщается для изучения сжимаемой магнитогидродинамической турбулентности. Это позволит в будущем применять метод крупных вихрей ко многим МГД-течениям, где не только большие числа Рейнольдса, но и числа Маха отличны от нуля. Исследована применимость различных подсеточных параметризаций для различных параметров подобия. Также исследованы спектры флуктуаций плотности и энергии в сжимаемой магнитогидродинамической турбулентной плазме для политропного уравнения состояния и показана возможность существования режима слабосжимаемых турбулентных пульсаций, когда флуктуации плотности являются пассивным скаляром. Результаты моделирования были использованы для интерпретации известных спутниковых данных о флуктуациях плотности локальной межзвездной среды.

## 1. МЕТОД КРУПНЫХ ВИХРЕЙ ДЛЯ СЖИМАЕМОЙ МГД-ТУРБУЛЕНТНОСТИ ПОЛИТРОПНОЙ ПЛАЗМЫ

В этом разделе метод LES разрабатывается и применяется для моделирования сжимаемой затухающей МГД-турбулентности при различных числах подобия: гидродинамического числа Рейнольдса, магнитного числа Рейнольдса и звукового числа Маха. Формулируются различные подсеточные модели замыкания и проводятся численные исследования пяти подсеточных параметризаций: модель Смагоринского; модель Колмогорова; модель, основанная на взаимной спиральности скорости и магнитного поля; модель подобия масштабов и смешанная модель (*Chernyshov et al., 2006a–c, 2007a, b, 2008a, b*).

Данный раздел организован следующим образом. В параграфе 1.1 представлена исходная система уравнений магнитной гидродинамики в размерных единицах, произведено преобразование уравнений к безразмерному виду. Параграф 1.2 посвящен теории метода крупных вихрей, получены отфильтрованные уравнения сжимаемой магнитогидродинамики с использованием политропного соотношения между давлением и плотностью. Подсеточное моделирование и различные модели замыкания для сжимаемых МГД течений (модель Смагоринского; модель Колмогорова; модель, основанная на взаимной спиральности скорости и магнитного поля; модель подобия масштабов и смешанная модель) рассматриваются в параграфе 1.3. Численные методы, схемы, начальные и граничные условия описаны в параграфе 1.4 данного раздела. В параграфе 1.5 представлены различные случаи МГД-турбулентности, рассматриваемые в этой работе, и результаты, полученные прямым численным моделированием и методом крупных вихрей в различных диапазонах магнит-

ного числа Рейнольдса, гидродинамического числа Рейнольдса и числа Маха. Выводы представлены в конце раздела.

### 1.1. Уравнения магнитной гидродинамики

В этом параграфе будет представлена система уравнений сжимаемой магнитной гидродинамики для случая политропного газа, произведены преобразования магнитогидродинамических уравнений к виду, удобному для дальнейшего рассмотрения. Система уравнений приводится к безразмерному виду.

Запишем исходную систему магнитогидродинамических уравнений сжимаемой жидкости в следующем виде:

*уравнение неразрывности*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0; \quad (1)$$

*уравнение количества движения*

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \sigma_{ij}) - \frac{1}{c} \varepsilon_{ijk} j_j B_k = 0; \quad (2)$$

*уравнение магнитной индукции*

$$\frac{\partial B_i}{\partial t} = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} \varepsilon_{klm} (B_l u_m) + \eta \frac{\partial^2 B_i}{\partial x_j^2}; \quad (3)$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4)$$

где  $\rho$  — плотность;  $p$  — давление;  $u_j$  — скорость в направлении  $x_j$ ;

$\sigma_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu S_{kk} \delta_{ij} + \zeta S_{kk} \delta_{ij}$  — вязкий тензор напряжений;

$S_{ij} = 1/2 (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$  — тензор скорости деформации;

$\mu$  — динамический (молекулярный) коэффициент вязкости;

$\zeta$  — объемный коэффициент вязкости;  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера;

$\varepsilon_{ijk}$  — тензор Леви – Чивита;

$\eta = \frac{c^2}{4\pi\sigma}$  — коэффициент магнитной диффузии;

$\sigma$  — удельная электрическая проводимость;

$F_l = \frac{1}{c} \varepsilon_{ijk} j_j B_k$  — сила Лоренца;

$B_j$  — магнитное поле в направлении  $x_j$ ;  $j$  — плотность тока.

Преобразуем систему уравнений магнитной гидродинамики (1)–(4), воспользовавшись уравнениями Максвелла, а также приведем ее к безразмерному виду. Приближение МГД предполагает, что энергия электрического поля значительно меньше, чем энергия магнитного поля. В таком случае все электромагнитные характеристики можно выразить через величины магнитного поля.

В результате можно рассматривать и исследовать только взаимодействие между магнитным и гидродинамическим полями. При численном моделировании традиционно используют уравнения, записанные в безразмерном виде, поскольку так гораздо удобнее вести расчеты и легче менять характерные параметры задачи. Для обезразмеривания использовалась стандартная процедура с характерными значениями скорости —  $u_0$ , плотности —  $\rho_0$ , времени —  $L_0/U_0$ , магнитного поля —  $B_0$ , давления —  $p_0$ , динамической вязкости —  $\mu_0$ , магнитной диффузии —  $\eta_0$ , масштаб длины —  $L_0$ . Для многих задач космической физики используется предположение о политропности процесса. Такая модель используется и эффективно применяется при исследовании и моделировании сжимаемой турбулентности нейтральной и магнитной жидкости (Haugen, Brandenburg, 2004), турбулентности солнечного ветра (Goldstein et al., 1995), турбулентности в межзвездном газе (Elmegreen, Scalo, 2004), а также в других задачах астрофизической турбулентности (Brandenburg, 2003). Это приводит к тому, что вместо громоздкого и сложного уравнения сохранения энергии для замыкания системы уравнений используется политропное соотношение между плотностью и давлением, а именно  $p = \rho^\gamma$ , где  $\gamma$  — показатель политропы. В этом случае система уравнений сжимаемой магнитной гидродинамики сводится к более простому виду:

*уравнение неразрывности*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0; \quad (5)$$

*уравнение количества движения*

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\rho^\gamma}{\gamma M_s^2} \delta_{ij} - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{1}{2M_a^2} \frac{\partial}{\partial x_j} (B^2 \delta_{ij}) - \frac{1}{M_a^2} \frac{\partial B_i B_j}{\partial x_j} = 0; \quad (6)$$

*уравнение магнитной индукции*

$$\frac{\partial B_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j B_i - u_i B_j) - \frac{1}{\text{Re}_m} \frac{\partial^2 B_i}{\partial x_j^2} = 0; \quad (7)$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial x_i} = 0. \quad (8)$$

Здесь, в уравнениях (5)–(8), использовались следующие безразмерные параметры подобия:  $\text{Re} = \rho_0 u_0 L_0 / \mu_0$  — гидродинамическое число Рейнольдса;  $\text{Re}_m = u_0 L_0 / \eta_0$  — магнитное число Рейнольдса;  $M_s = u_0 / c_s$  — (звуковое) число Маха;  $M_a = u_0 / u_a$  — магнитное (альфвеновское) число Маха, где  $c_s$  — скорость звука, определяемая соотношением:  $c_s = \sqrt{\gamma p_0 / \rho_0}$ ;  $u_a$  — альфвеновская скорость;  $u_a = B_0 / \sqrt{4\pi \rho_0}$ .

В следующем параграфе сформулируем метод крупных вихрей для системы МГД-уравнений для политропного газа (5)–(8).

### 1.2. Формулировка метода крупных вихрей

Данный параграф посвящен формулировке теории метода крупных вихрей для сжимаемой магнитогидродинамики, получены отфильтрованные уравнения для полной системы уравнений и для случая политропного газа.

В методе крупных вихрей к исходным уравнениям применяется операция фильтрации, которая была предложена Леонардом (*Leonard, 1974*). Каждый физический параметр разлагается на крупномасштабную (отфильтрованную) и мелкомасштабную составляющие, причем эффекты на больших масштабах рассчитываются непосредственно, а на мелких — моделируются.

Для фильтрации уравнений магнитной гидродинамики в методе LES используется фильтр, удовлетворяющий свойству нормировки:

$$\int_a^b G(x_j - x_j, \bar{\Delta}_j) dx_j = 1. \tag{9}$$

Здесь  $G(x_j - x_j, \bar{\Delta}_j)$  является фильтром.

Отфильтрованная скорость тогда выражается как

$$\bar{u}_j = \int_a^b u(x_j) G(x_j - x_j, \bar{\Delta}_j) dx_j, \tag{10}$$

где  $a = x_j - \frac{1}{2}\bar{\Delta}_j$  и  $b = x_j + \frac{1}{2}\bar{\Delta}_j$ ;  $\bar{\Delta}_j = (\bar{\Delta}_x, \bar{\Delta}_y, \bar{\Delta}_z)$ ;  $x_j = (x, y, z)$  — оси декартовой системы координат.

Другие параметры движения фильтруются аналогично.

Все переменные задачи представим как сумму отфильтрованной (соответствует большим масштабам) и неотфильтрованной части (малый масштаб):  $u = \bar{u} + u'$ ,  $B = \bar{B} + B'$ ,  $p = \bar{p} + p'$  и т. д.

Средневзвешенная фильтрация определяется как

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}. \tag{11}$$

Для обозначения фильтрации в (11) используются два символа: черта сверху обозначает обычную фильтрацию, в то время как тильда — средневзвешенную фильтрацию.

Тогда отфильтрованная по Фавру скорость будет иметь вид

$$u_j = \frac{\overline{\rho u_j}}{\bar{\rho}} = \frac{\int_a^b \rho u_j G(x_j - x_j, \bar{\Delta}_j) dx_j}{\int_a^b \rho(x_j) G(x_j - x_j, \Delta_j) dx_j}. \tag{12}$$

Следовательно, величины, осредненные по Фавру, можно представить в виде суммы, например для скорости:  $u = \tilde{u} + u''$ . Здесь используется двойной

штрих для обозначения мелкомасштабной части величины, которая фильтруется по Фавру.

Свойства средневзвешенной фильтрации тогда выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned}\overline{\rho u''} &\neq 0; \\ \tilde{u} &\neq \tilde{u}; \\ \tilde{u}'' &\neq 0.\end{aligned}\tag{13}$$

Важно отметить, что простого соотношения между величинами, отфильтрованными по Фавру и традиционным способом, не существует. Чтобы получить  $\bar{u}$ , имея  $\tilde{u}$ , необходимо знать пульсации плотности.

Магнитное поле, так же как плотность и давление, фильтруется традиционным способом, чтобы не усложнять расчеты, так как в уравнениях магнитной гидродинамики отсутствуют произведения плотности и магнитного поля.

Применив операцию средневзвешенной фильтрации, запишем систему магнитогидродинамических уравнений в виде:

*отфильтрованное уравнение неразрывности*

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0;\tag{14}$$

*отфильтрованное уравнение сохранения количества движения*

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} - \frac{1}{\text{Re}} \sigma_{ij} + \frac{\bar{B}^2}{2M_a^2} \delta_{ij} - \frac{1}{2M_a^2} \bar{B}_j \bar{B}_i \right) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (t_{ji}^u + t_{ji}^B) = - \frac{\partial \tau_{ji}^u}{\partial x_j};\tag{15}$$

*отфильтрованное уравнение индукции*

$$\frac{\partial \bar{B}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_j \bar{B}_i - \tilde{u}_i \bar{B}_j) - \frac{1}{\text{Re}_m} \frac{\partial^2 \bar{B}}{\partial x_j^2} = - \frac{\partial \tau_{ji}^b}{\partial x_j};\tag{16}$$

так как

$$\begin{aligned}\bar{\eta B}_j - \bar{\eta} \bar{B}_j &= 0; \\ \tilde{\sigma}_{ij} - \tilde{\sigma}_{ij} &= 0; \\ C_v + R &= C_p; \quad C_p = \gamma C_v,\end{aligned}$$

$$\text{где } \tilde{\sigma}_{ij} = 2\tilde{\mu} \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \tilde{\mu} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} + \tilde{\zeta} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij}; \quad \bar{\sigma}_{ij} = 2\bar{\mu} S_{ij} - \frac{2}{3} \bar{\mu} S_{kk} \delta_{ij} + \bar{\zeta} S_{kk} \delta_{ij}.$$

В расчетах обычно пренебрегают последним слагаемым, полагая, что объемный коэффициент вязкости  $\zeta$  равен нулю.

В правой части уравнений (15), (16) слагаемые обозначают влияние подсеточных членов на отфильтрованную часть:

$$\tau_{ij}^u = \bar{\rho} \left( \overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \right) - \frac{1}{M_a^2} \left( \overline{B_i B_j} - \bar{B}_i \bar{B}_j \right); \quad (17)$$

$$\tau_{ij}^b = \left( \overline{u_i B_j} - \tilde{u}_i \bar{B}_j \right) - \left( \overline{B_i u_j} - \bar{B}_i \tilde{u}_j \right). \quad (18)$$

Следует отметить существенное упрощение при использовании фильтрации по Фавру. Действительно, традиционная фильтрация приводит к следующему виду уравнения неразрывности и количества движения:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho u_j} - \bar{\rho} \bar{u}_j \right); \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho u_i u_j} + \bar{p} \delta_{ij} - \sigma_{ij} + \frac{\bar{B}^2}{8\pi} \delta_{ij} - \frac{1}{4\pi} \bar{B}_j \bar{B}_i \right) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho u_j u_i} - \bar{\rho} \bar{u}_j \bar{u}_i \right) + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{B_j B_i} - \bar{B}_j \bar{B}_i \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \overline{\rho u_i} - \bar{\rho} \bar{u}_i \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Как хорошо видно, в уравнениях (19) и (20) появляются дополнительные слагаемые, связанные с переносом массы, по сравнению с видом уравнений, отфильтрованных по Фавру, в чем и состоит главное преимущество средневзвешенной фильтрации для сжимаемой жидкости.

Рассмотрим подробнее получившиеся уравнения (14)–(16). Так как мелко-масштабная скорость (то же верно и для других характеристик движения заряженной жидкости)  $u'' = u - \tilde{u}$  не известна, она должна быть оценена с использованием крупномасштабной скорости, полученной посредством фильтрации. В принципе, функциональной зависимости между мелко-масштабной скоростью  $u''$  и крупномасштабной —  $\tilde{u}$  нет, поэтому любая оценка  $u''$  будет содержать ошибку. Как правило, для оценки этой ошибки используются результаты, получаемые с помощью прямого численного моделирования (DNS), причем анализ проводится для малых значений числа Рейнольдса в силу ограниченности вычислительных ресурсов.

Влияние на отфильтрованную часть подсеточных слагаемых, которые появляются в правой части уравнений магнитной гидродинамики (15), (16), моделируется посредством SGS-слагаемых. Учет сжимаемости приводит к усложнению вида тензора подсеточных напряжений в уравнении Навье – Стокса  $\tau_{ij}^u$ , связанного с появлением отфильтрованной плотности по сравнению с несжимаемым течением. Однако магнитный тензор SGS-напряжений  $\tau_{ij}^b$ , возникающий в уравнении индукции, сохраняет такой же вид, как и для несжимаемого МГД-течения.

Перепишем нелинейные слагаемые в уравнении сохранения количества движения:

$$\bar{\rho} \overline{u_i u_i} = \bar{\rho} \overline{(\tilde{u}_i + u_i'')(\tilde{u}_j + u_j'')} = \bar{\rho} \left( \overline{\tilde{u}_j \tilde{u}_i} + \overline{\tilde{u}_j u_i''} + \overline{\tilde{u}_j u_i''} + \overline{u_j'' u_i''} \right); \quad (21)$$

$$\overline{B_j B_i} = \overline{(\overline{B_i} + B'_i)(\overline{B_j} + B'_j)} = \overline{(\overline{B_i} \overline{B_j} + \overline{B_i} B'_j + \overline{B_j} B'_i + B'_i B'_j)}. \quad (22)$$

Так как нелинейные члены должны быть выражены через крупномасштабные величины, запишем нелинейные слагаемые в виде:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho \tilde{u}_j u_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_j u_i} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} t_{ji}^u; \quad (23)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{B_j B_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{B_i B_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{B_j B_i} - \overline{B_i B_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{B_i B_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} t_{ji}^B, \quad (24)$$

где  $t_{ji}^u$  и  $t_{ji}^B$  — гидродинамическая и магнитная части  $\tau_{ji}^u$  турбулентного тензора напряжений в правой части уравнения (15). Они могут быть представлены как

$$t_{ij}^u = \overline{\rho (\tilde{u}_i u_j - \tilde{u}_j \tilde{u}_i)} = \overline{\rho (\tilde{u}_i u_j - \tilde{u}_j \tilde{u}_i)} + \overline{\rho (\tilde{u}_i u_j'' + \tilde{u}_j u_i'')} + \overline{\rho (u_i'' u_j'')}, \quad (25)$$

$$\begin{aligned} t_{ij}^B &= -\frac{1}{M_a^2} (\overline{B_i B_j} - \overline{B_i B_j}) = \\ &= -\frac{1}{M_a^2} \left[ (\overline{B_i B_j} - \overline{B_i B_j}) + (\overline{B_i B'_j} + \overline{B_j B'_i}) + (\overline{B'_i B'_j}) \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

В формулах (25) и (26) в правой части первое слагаемое в скобках, называемое леонардовским (Leonard term), отвечает за перераспределение энергии между крупномасштабными значениями и мелкомасштабными как для скорости, так и для магнитного поля. Второй член — перекрестный (cross) — включает как прямой каскад энергии, так и обратный (backscatter, т. е. от мелкого масштаба к крупному (например, несколько небольших вихрей сливаются в один крупный)). И, наконец, третий член — слагаемое Рейнольдса (Reynolds term) — представляет собой диссипацию энергии (outscatter) на маленьких масштабах (соответствует большим волновым числам).

Аналогично в отфильтрованном уравнении индукции (16) появляется тензор  $\tau_{ij}^b$ , который имеет вид

$$\tau_{ij}^b = \overline{(u_i B_j - \tilde{u}_i \tilde{B}_j)} - \overline{(B_i u_j - \tilde{B}_i \tilde{u}_j)}. \quad (27)$$

Таким образом, в отфильтрованной системе магнитогидродинамических уравнений содержатся неизвестные турбулентные тензоры:  $\tau_{ij}^u$  и  $\tau_{ij}^b$ . Для того чтобы их определить, необходимо использовать специальные турбулентные замыкания (параметризации), основанные на крупномасштабных значениях величин, характеризующих турбулентное магнитогидродинамическое течение.

Именно подсеточные модели SGS связывают тензоры  $\tau_{ij}^u$ ,  $\tau_{ij}^b$  с величинами  $u_i$  и  $B_j$ . Основная цель любой подсеточной параметризации в методе LES — это адекватное описание изменения энергии крупномасштабного движения, при этом, по сути, моделируется турбулентный каскад Ричардсона.

### 1.3. Подсеточное моделирование

В этом параграфе обсудим подсеточное моделирование в методе крупных вихрей и предложим различные модели замыкания для сжимаемой магнитогидродинамической турбулентности.

Вначале рассмотрим замыкания для  $\tau_{ij}^u$  и  $\tau_{ij}^b$ . Когда в явном виде не рассматривается уравнение энергии, а вместо него предполагается выполнение политропного соотношения, возникают только эти два подсеточных слагаемых. Для замыкания системы уравнений нужно найти такие параметризации для  $\tau_{ij}^u$  и  $\tau_{ij}^b$ , которые бы связывали эти тензоры с известными крупномасштабными значениями параметров течения. Для турбулентных подсеточных тензоров должны выполняться условия реализуемости, которые гарантируют неотрицательность подсеточной энергии. Необходимое и достаточное условие неотрицательности обеспечивается выполнением положительности полуопределенной формы для турбулентного тензора  $\tau_{ij}$ , следовательно, выполняются соотношения:

$$\begin{aligned} \tau_{ii} &\geq 0 \quad \text{для } i \in \{1, 2, 3\}, \\ |\tau_{ij}| &\leq \sqrt{\tau_{ii}\tau_{jj}} \quad \text{для } i, j \in \{1, 2, 3\}, \\ \det(\tau_{ij}) &\geq 0. \end{aligned} \tag{28}$$

Будем считать, что турбулентный тензор  $\tau_{ij}^u$  связан с тензором скоростей деформации и вязкостью (модель вихревой вязкости), а  $\tau_{ij}^b$  — с диссипацией из-за сопротивления (т. е. эта диссипация выражается через обобщенный закон Ома и равна  $\eta j$  (Theobald et al., 1994), где  $j = \nabla \times B / \text{Re}_m$  — плотность электрического тока), следующим образом:

$$\tau_{ij}^u - \frac{1}{3}\tau_{kk}^u \delta_{ij} = -2\nu_t \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right), \tag{29}$$

$$\tau_{ij}^b - \frac{1}{3}\tau_{kk}^b \delta_{ij} = -2\eta_t \bar{J}_{ij}, \tag{30}$$

где  $\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$  — крупномасштабный тензор скорости деформации;

$\bar{J}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{B}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{B}_j}{\partial x_i} \right)$  — крупномасштабный тензор магнитной ротации;  $\nu_t$  и  $\eta_t$  —

скалярные турбулентные функции, зависящие от пространственных координат и от времени.

В правой части уравнений (29) и (30) опущены симметричные слагаемые, содержащие магнитный тензор деформации в виде  $\bar{S}_{ij}^b = \left( \frac{\partial \bar{B}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{B}_j}{\partial x_i} \right) / 2$  и вихревой тензор  $\tilde{J}_{ij}^u = \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) / 2$  соответственно, так как их роль

пренебрежимо мала (Müller, Carati, 2002). Заметим, что основная цель подсеточного моделирования состоит не в полной реконструкции потерянной информации вследствие фильтрации, а в моделировании влияния мелкомасштабной динамики на крупномасштабное распределение энергии.

Иногда членом  $\frac{1}{3}\tau_{kk}^u \delta_{ij}$  пренебрегают, связывая его с термодинамическим давлением (Erlebacher et al., 1992) —  $\nabla(p + \frac{2}{3}k\delta_{ij})$ , где  $k = (\tau_{11} + \tau_{22} + \tau_{33})/2$  — подсеточная турбулентная кинетическая энергия. В настоящей работе рассмотрим более общий случай, учитывающий изотропное слагаемое (подсеточный изотропный член в (30) равен нулю, так как  $J_{ij}$  в этом случае обращается в нуль).

Подсеточное изотропное слагаемое найдем из условий реализуемости (28). Используя данные неравенства, можно записать для подсеточного тензора напряжений  $\tau_{ij}$  следующее соотношение:

$$\tau_{12}^2 + \tau_{13}^2 + \tau_{23}^2 \leq \tau_{11}\tau_{22} + \tau_{11}\tau_{33} + \tau_{22}\tau_{33}. \quad (31)$$

Подставляя сюда значения из (29), можно получить оценку для изотропного члена (Vreman, 1995):

$$k \geq \frac{1}{2}\sqrt{3} \left( v_t \left| S^u \right| \right). \quad (32)$$

Здесь  $\left| \tilde{S}^u \right| = \left( 2\tilde{S}_{ij}^u \tilde{S}_{ij}^u \right)^{1/2}$ .

Таким образом, предполагая различные замыкания и параметризуя  $v_t$ , получим значения анизотропной части подсеточного слагаемого из (29) и изотропного из (32). В следующем разделе представим модели, использовавшиеся в настоящей работе.

### 1.3.1. Модель Смагоринского для МГД-турбулентности

Модель Смагоринского является моделью вихревой вязкости, где подсеточные масштабы предполагаются изотропными и находятся в равновесии с крупномасштабным течением (Smagorinsky, 1963). Расширенная модель Смагоринского для сжимаемого МГД-случая запишется в виде

$$\tau_{ij}^u - \frac{1}{3}\tau_{kk}^u \delta_{ij} = -2C_1 \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 \left| \tilde{S}^u \right| \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right), \quad (33)$$

$$\tau_{ij}^b = -2D_1 \bar{\Delta}^2 \left| \bar{j} \right| \bar{J}_{ij}. \quad (34)$$

Здесь  $\bar{j}$  — крупномасштабная плотность электрического тока. Величина  $v_t$  — это аналог сдвига по скорости, имеющийся в (33) для  $v_t$ , замененного здесь на сдвиг в магнитном поле (34) (который является плотностью тока (Theobald et al., 1994)).

Неравенство (32) позволяет найти подсеточную модель для турбулентной кинетической энергии  $k$ , соответствующую модели вихревой вязкости (Vreman, 1995). Подставляя в (32) значение для турбулентной вязкости из (33), находим:

$$k \geq \frac{1}{2} \sqrt{3} C_s \bar{\rho}_\Delta^2 \left| \tilde{S}^u \right|^2. \quad (35)$$

Отсюда получим подсеточное замыкание для изотропного слагаемого в виде (*Vreman*, 1995):

$$\tau_{kk}^u = 2Y_1 \bar{\rho}_\Delta^2 \left| \tilde{S}^u \right|^2. \quad (36)$$

где  $Y_1$  — константа, которая обеспечивает переход от неравенства (35) к равенству (36) и попадание в область определения турбулентной кинетической энергии, т. е. выполнение (35).

Для других подсеточных моделей, которые будут представлены ниже, изотропные члены определяются аналогично.

Расширенная на МГД-случай модель Смагоринского дает достаточную диссипацию и диффузию, которые, кроме того, стабилизируют численные вычисления. К недостаткам данной модели относится неуниверсальность констант  $C_1$ ,  $Y_1$  и  $D_1$ . Действительно, если задавать определенное положительное значение констант, не учитывается обратный каскад энергии (backscatter), а при отрицательном значении — прямой каскад передачи энергии.

### 1.3.2. Модель Колмогорова для МГД-турбулентности

В зависимости от способа оценки SGS-членов можно сконструировать различные модели замыкания. Если фильтр находится в инерциальном интервале полностью развитой турбулентности, то предполагают, что нелинейное взаимодействие между крупномасштабной кинетической и магнитной энергией намного меньше, чем энергия диссипации, поэтому можно считать, что подсеточная кинетическая и магнитная энергия зависят только от времени. Также предполагается, что коэффициент, отвечающий за размерность, равен единице (*Müller, Carati*, 2002). Эти параметризации основываются на колмогоровском скейлинге:

$$\tau_{ij}^u - \frac{1}{3} \tau_{kk}^u \delta_{ij} = -2C_2 \bar{\rho}_\Delta^{4/3} \left\{ \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right\}, \quad (37)$$

$$\tau_{ij}^b = -2D_2 \bar{\Delta}^{4/3} \tilde{J}_{ij}, \quad (38)$$

$$\tau_{kk}^u = 2Y_2 \bar{\rho}_\Delta^{4/3} \left| \tilde{S}^u \right|. \quad (39)$$

Константы, применяемые в одной модели, будут отличаться от констант, которые используются в другом методе замыкания уравнений. Все недостатки, относящиеся к константам в моделях Смагоринского и Колмогорова, совпадают.

### 1.3.3. Модель, основанная на перекрестной спиральности

Определим перекрестную (другое название — взаимную) спиральность между полем скорости и магнитным полем следующим образом:  $H^c = \int_V (uB) dV$ .

В МГД-турбулентности находят характерные значения турбулентной скорости и магнитного поля, и перекрестная спиральность связана с обменом между кинетической и магнитной энергиями, вызванными силой Лоренца (*Müller, Carati, 2002*). Поэтому спиральность позволяет найти энергетический обмен между крупными масштабами и мелкими в методе LES:

$$\tau_{ij}^u - \frac{1}{3} \tau_{kk}^u \delta_{ij} = -2C_3 \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 |\tilde{f}| \left| \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right|, \quad (40)$$

$$\tau_{ij}^b = -2D_3 \Delta^2 \operatorname{sgn}(\bar{j} \tilde{\omega}) |\bar{j} \tilde{\omega}|^{1/2} \bar{J}_{ij}, \quad (41)$$

$$\tau_{kk}^u = 2Y_3 \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 |\tilde{f}| |\tilde{S}^u|. \quad (42)$$

Здесь  $\tilde{S}_{ij}^b = (\partial \bar{B}_i / \partial x_j + \partial \bar{B}_j / \partial x_i) / 2$ ,  $\tilde{S}_{ij} = (\partial \tilde{u}_i / \partial x_j + \partial \tilde{u}_j / \partial x_i) / 2$ ,  $\tilde{f} = |\tilde{S}_{ij} \bar{S}_{ij}^b|^{1/2}$ ,  $\tilde{\omega} = \nabla \times \tilde{u}$  — крупномасштабная завихренность.

В модели, основанной на перекрестной спиральности, только магнитная диффузия  $\eta_i$  может менять знак (в (41) функция  $\operatorname{sgn}(\dots)$  определяет знак аргумента), так как в магнитогидродинамической турбулентности только магнитная энергия отвечает за процесс переноса от мелких (т. е. подсеточных) к крупным масштабам (*Müller, Carati, 2002*).

### 1.3.4. Модель подобия масштабов для МГД-турбулентности

Здесь неизвестные турбулентные тензоры моделируются в предположении, что они пропорциональны леонардовскому члену и модель подобия масштабов не является моделью вихревой вязкости. Этот подход базируется на предположении об универсальном характере турбулентности на небольших масштабах, а именно, что самые энергоемкие подсеточные компоненты в каскаде энергии из больших к мелким масштабам могут быть оценены с достаточной точностью из наименьших крупномасштабных вихрей, получаемых после операции фильтрации. Этот метод относительно прост, однако он не обеспечивает необходимого количества диссипации энергии в гидродинамике нейтральной жидкости. Модель подобия масштабов была предложена Бардинá (*Bardiná et al., 1980*) и исследована Лиу (*Liu et al., 1994*). Для сжимаемой МГД-турбулентности запишем

$$\tau_{ij}^u = \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) - \frac{1}{M_a^2} (\overline{\tilde{B}_i \tilde{B}_j} - \bar{\tilde{B}_i} \bar{\tilde{B}_j}), \quad (43)$$

$$\tau_{ij}^b = (\overline{\tilde{u}_i \tilde{B}_j} - \tilde{u}_i \bar{\tilde{B}_j}) - (\bar{\tilde{B}_i} \tilde{u}_j - \bar{\tilde{B}_i} \tilde{u}_j). \quad (44)$$

Модель подобия масштабов (43), (44) в отличие от других моделей может быть вычислена в методе LES с использованием отфильтрованных величин турбулентного движения.

### 1.3.5. Смешанная модель для МГД-турбулентности

Для гидродинамического случая Специале (*Speziale et al.*, 1988) предложил объединить два разных подхода — модель подобия масштаба и модель вихревой вязкости, а Занг (*Zang et al.*, 1993) впервые использовал динамическую форму смешанной модели, где модельная константа определялась динамически на каждом временном шаге. В данной работе расширенная смешанная модель для сжимаемой МГД-турбулентности записывается в следующем виде:

$$\tau_{ij}^u - \frac{1}{3}\tau_{kk}^u \delta_{ij} = -2C_5 \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 |\tilde{S}^u| \left[ \tilde{S}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tilde{S}_{kk} \right] + \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) - \frac{1}{M_a^2} (\overline{\tilde{B}_i \tilde{B}_j} - \overline{\tilde{B}_i} \overline{\tilde{B}_j}), \quad (45)$$

$$\tau_{ij}^b = -2D_5 \bar{\Delta}^2 |\bar{j}| \bar{J}_{ij} + (\overline{\tilde{u}_i \tilde{B}_j} - \overline{\tilde{u}_i} \overline{\tilde{B}_j}) - (\overline{\tilde{B}_i \tilde{u}_j} - \overline{\tilde{B}_i} \overline{\tilde{u}_j}), \quad (46)$$

$$\tau_{kk}^u = 2Y_5 \bar{\rho} \bar{\Delta}^2 |\tilde{S}^u|^2. \quad (47)$$

Как видно из формул (45), (46), смешанная модель является комбинацией двух моделей: модели подобия масштабов и модели Смагоринского для сжимаемого МГД-случая.

### 1.3.6. Динамическая процедура определения констант

Для того чтобы устранить проблему, связанную с выбором значений констант, Германо была предложена динамическая процедура (*Germano et al.*, 1991), которая определяет значение константы на каждом шаге. Для этого используется дополнительный тестовый фильтр, причем ширина тестового фильтра больше ширины основного фильтра.

Пусть  $T_{ij}^u$  и  $T_{ij}^b$  являются тестовыми подсеточными тензорами, которые получаются при использовании тестового фильтра, соответственно для  $\tau_{ij}^u$  и  $\tau_{ij}^b$ :

$$T_{ij}^u = \hat{\tau}_{ij}^u + L_{ij}^u, \quad (48)$$

$$T_{ij}^b = \hat{\tau}_{ij}^b + L_{ij}^b, \quad (49)$$

где леонардовские тензоры определяются как:

$$L_{ij}^u = \left( \frac{\widehat{\rho u_i \rho u_j}}{\widehat{\rho}} \right) - \frac{\widehat{\rho u_i} \widehat{\rho u_j}}{\widehat{\rho}} - \frac{1}{M_a^2} \left( \widehat{\tilde{B}_i \tilde{B}_j} - \widehat{\tilde{B}_i} \widehat{\tilde{B}_j} \right), \quad (50)$$

$$L_{ij}^b = \left( \left( \frac{\widehat{\rho u_i \tilde{B}_j}}{\widehat{\rho}} \right) - \frac{\widehat{\rho u_i} \widehat{\tilde{B}_j}}{\widehat{\rho}} \right) - \left( \left( \frac{\widehat{\tilde{B}_i \rho u_j}}{\widehat{\rho}} \right) - \frac{\widehat{\tilde{B}_i} \widehat{\rho u_j}}{\widehat{\rho}} \right). \quad (51)$$

Здесь знак  $\hat{\phantom{x}}$  — тестовая фильтрация переменной. Леонардовские тензоры могут быть определены из крупномасштабных значений скорости и магнитного поля. Соотношения (50) и (51) устанавливают связь между исходными подсеточными и тестовыми тензорами.

Обозначим турбулентную вязкость и магнитную диффузию следующим образом:

$$\nu_t = C_s \alpha_{ij}^u \quad (\text{для } \tau_{ij}^u), \quad \nu_t = C_I \alpha^u \quad (\text{для } \tau_{kk}^u), \quad \eta_t = D \varphi_{ij}^B \quad (\text{для } \tau_{ij}^b).$$

Для определения констант используем метод наименьших квадратов, для того чтобы минимизировать ошибку функционалов (Lilly, 1992):

$$Z^u = \left\langle \left( T_{ij}^u - \hat{\tau}_{ij}^u - L_{ij}^u \right)^2 \right\rangle,$$

$$Z^b = \left\langle \left( T_{ij}^b - \hat{\tau}_{ij}^b - L_{ij}^b \right)^2 \right\rangle.$$

Угловые скобки обозначают пространственное усреднение.

Константы определяются динамически на каждом временном шаге по формулам

$$C_s = \frac{\langle L_{ij}^u M_{ij}^u \rangle}{\langle M_{ij}^u M_{ij}^u \rangle}, \quad (52)$$

$$Y_I = \frac{\langle L_{kk}^u \rangle}{\langle \alpha^u | \hat{S}^u | -\alpha^u | S^u \rangle}, \quad (53)$$

$$D = \frac{\langle L_{ij}^b m_{ij}^B \rangle}{\langle m_{ij}^B m_{lk}^B \rangle}, \quad (54)$$

где

$$M_{ij}^u = \hat{\alpha}_{ij}^u \left[ \hat{S}_{ij}^u - \frac{\delta_{ij}}{3} \hat{S}_{kk}^u \right] - \left[ \alpha_{ij}^u \left[ \tilde{S}_{ij}^u - \frac{\delta_{ij}}{3} \tilde{S}_{kk}^u \right] \right]^{\wedge},$$

$$m_{ij}^B = \varphi_B \bar{J}_{ij} - \widehat{\varphi_B \bar{J}_{ij}}.$$

Здесь [...]  $\wedge$  обозначает, что операция тестовой фильтрации относится ко всему выражению в квадратных скобках.

Отметим, что переменные задачи, фильтруемые по Фавру в исходных уравнениях, должны фильтроваться по Фавру и в случае применения тестового фильтра. Запись  $\hat{u}$  понимается здесь как  $\hat{u} = \widehat{\rho u} / \hat{\rho}$ . Характерная ширина тестового фильтра, как правило, берется в два раза больше, т. е.  $\hat{\Delta} = 2\bar{\Delta}$ .

Важно отметить, что значения констант могут быть и отрицательными, что соответствует обратному каскаду энергии (backscatter), т. е. увеличению энергии для крупномасштабного течения. Во избежание численной неустойчивости необходимо ограничить значения констант таким образом, чтобы обеспечить неотрицательность общей вязкости (турбулентная плюс молекулярная).

#### 1.4. Численные методы, используемые при моделировании сжимаемой МГД-турбулентности

В данном разделе представлены численные методы, которые использовались в работе при моделировании сжимаемой МГД турбулентности.

Для временной интеграции использовался модифицированный явный метод Рунге – Кутта третьего порядка точности, предложенный Вильямсоном (*Williamson*, 1980), который требует меньше ресурсов оперативной памяти по сравнению со стандартным методом Рунге – Кутта. В данном модифицированном методе Рунге – Кутта необходимо содержать в памяти только два набора переменных. Такой численный подход прекрасно работает для сколь угодно высокого порядка точности, хотя не все схемы Рунге – Кутта могут быть записаны в  $2N$ -виде (*Williamson*, 1980; *Brandenburg*, *Dobler*, 2002).

В данной работе использовался численный код с конечно-разностными схемами четвертого порядка точности. Для большинства задач МГД (*Orszag*, *Tang*, 1979; *Müller*, *Biskamp*, 2000; *Knaepen et al.*, 2004; *Müller*, *Grappin*, 2005) применялись различные спектральные методы (обычно для несжимаемой среды). Однако в данном исследовании используется конечно-разностный подход, который в отличие от спектрального метода более эффективен при решении задач со сложной геометрией, с различными граничными условиями, а также требует меньше компьютерных ресурсов и меньшего количества времени для вычислений (*Anderson*, 1995; *Brandenburg*, 2003). Мы используем для моделирования сжимаемой МГД турбулентности центрально-разностную схему четвертого порядка точности.

В работе разработан и создан численный код для системы уравнений магнитной гидродинамики, записанной в консервативной форме. Однако для нелинейных слагаемых применяется кососимметричная форма:

$$\Psi_i^d = \frac{(\partial \rho u_i u_j)}{\partial x_j}, \quad (55)$$

$$\Psi_i^a = \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_i \frac{(\partial \rho u_j)}{\partial x_j},$$

$$\Psi_i^s = \frac{1}{2} (\Psi_i^d + \Psi_i^a).$$

Соотношения (55) демонстрируют, каким образом получается косо-симметричная форма  $\Psi_i^s$ . Кососимметричная форма является фактически усреднением между дивергентной  $\Psi_i^d$  и конвективной  $\Psi_i^a$  формой нелинейного слагаемого. Хотя аналитически все три формы: кососимметричная, дивергентная и конвективная — эквивалентны, результаты численных расчетов будут отличаться. В статье (*Park et al.*, 2004) авторами было показано, что кососимметричная форма обеспечивает более точные результаты, так как уменьшаются ошибки,

связанные с дискретизацией при использовании конечно-разностного подхода для моделирования турбулентных течений.

Для разделения турбулентного течения на крупномасштабные и мелкомасштабные вихри применяется фильтр Гаусса четвертого порядка точности. В статье (*Sagaut, Grohens, 1999*) подробно изучались оптимальные дискретные формы цилиндрического фильтра и фильтр Гаусса для центрально-разностных схем различного порядка точности. Одномерный фильтр записывается в следующем виде (для  $x$ -направления):

$$\xi_i = \frac{\varepsilon^4 - 4\varepsilon^2}{1152} (\xi_{i-2} + \xi_{i+2}) + \frac{16\varepsilon^2 - \varepsilon^4}{288} (\xi_{i-1} + \xi_{i+1}) + \frac{\varepsilon^4 - 20\varepsilon^2 + 192}{192} \xi_i, \quad (56)$$

где  $\xi_i$  — величина, характеризующая поток жидкости в точке  $i$ ;  $\varepsilon$  — параметр, определенный как отношение размера численной сетки к ширине фильтра (*Sagaut, Grohens, 1999*). Константы в подсеточных моделях определяются с помощью динамической процедуры, для этого используется дополнительный тестовый фильтр с шириной фильтра в два раза больше, чем исходный.

Так как в работе рассматривается трехмерное сжимаемое турбулентное МГД-течение, то необходимо использовать трехмерный фильтр (мультиразмерный в общем случае). Мультиразмерный фильтр может быть сконструирован двумя различными способами. Первый — линейная комбинация одномерных фильтров, т. е. по каждому направлению физический параметр фильтруется независимо от других:

$$\xi^n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi^i, \quad (57)$$

где  $\xi^i$  — это одномерный фильтр в направлении  $i$ ;  $n$  — размерность рассматриваемого пространства. Линейная комбинация представляет собой одновременное применение всех одномерных фильтров по каждому пространственному направлению. Второй подход является последовательным умножением одномерных фильтров, т. е. это можно записать в следующем виде:

$$\xi^n = \prod_{i=1}^n \xi^i. \quad (58)$$

Такая процедура определения мультиразмерного фильтра  $\xi^n$  в отличие от первого случая представляет собой не одновременное, а последовательное применение одномерных фильтров. Точность мультиразмерных фильтров, построенных двумя различными методами, детально исследована и протестирована в работе (*Sagaut, Grohens, 1999*), где авторами показано, что последовательное произведение фильтров обеспечивает более точные результаты по сравнению с линейной комбинацией одномерных фильтров и поэтому используется формула (58) для трехмерной фильтрации.

Результаты LES сравниваются с вычислениями DNS, и качество LES определяется различием между отфильтрованными результатами DNS и LES. Начальные условия для LES получаются фильтрацией начальных условий

DNS. Начальное поле скоростей и магнитное поле формируются гиперболическим тангенциальным профилем, причем на начальное течение накладывается равномерный шум (в виде  $\sim \exp(-x_i/4)$ , так как экспоненциальное слагаемое обеспечивает затухание возмущений в свободном потоке). Начальные условия выбираются таким образом, чтобы обеспечить соленидальность магнитного поля, т. е. чтобы  $\operatorname{div} B = 0$ . При расчетах используется критерий Куранта – Фридрикса – Леви (CFL-condition) на ограничение временного шага для устойчивости вычислений. Периодические граничные условия ставились на всех границах расчетной области. Для получения DNS-результатов использовалась сетка с плотностью дискретизации  $256^3$ , а для LES —  $64^3$ . Расчетная область представляет собой трехмерный куб с размерами  $2\pi \times 2\pi \times 2\pi$ .

## 1.5. Численное моделирование затухающей МГД-турбулентности

### 1.5.1. Прямое численное моделирование

Для оценки эффективности различных подсеточных замыканий LES в этом разделе представлены результаты, полученные прямым численным моделированием МГД-турбулентности в различных диапазонах магнитного числа Рейнольдса, гидродинамического числа Рейнольдса и числа Маха.

Расчеты DNS проведены на сетке с достаточным измельчением для того, чтобы точность полученных результатов отражала реальную динамику трехмерной сжимаемой МГД-турбулентности и позволяла сравнить с расчетами LES. В приведенной в этой работе серии численных экспериментов варьировались следующие основные параметры, характеризующие течение заряженной жидкости: магнитное число Рейнольдса  $Re_m$ , гидродинамическое число Рейнольдса  $Re$ , число Маха  $M_s$ , а также тейлоровское число Рейнольдса  $Re_\lambda$ . Значение  $Re_\lambda$  определяется через тейлоровский микромасштаб  $\lambda$ :

$$\lambda^2 = 15\mu U^2 / \rho\varepsilon, \quad (59)$$

$$Re_\lambda = U\lambda\rho/\mu. \quad (60)$$

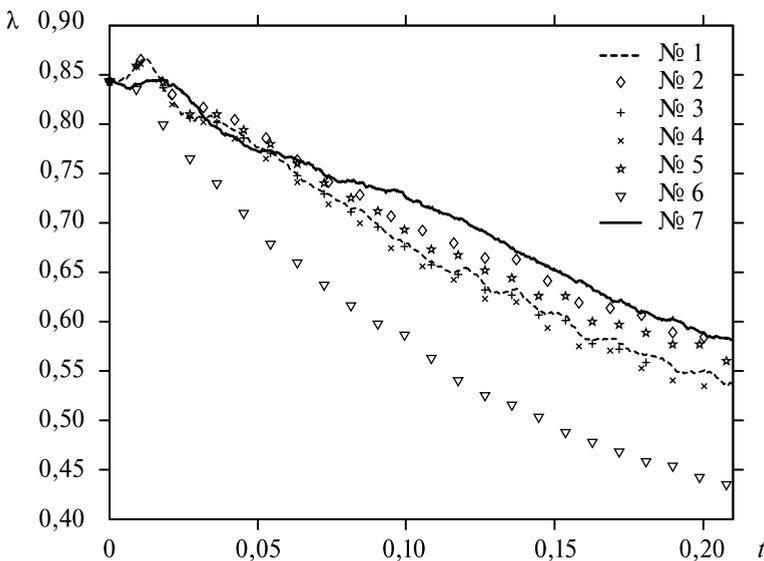
где  $U$  — среднеквадратичное значение скорости,  $\varepsilon$  — скорость диссипации энергии. Постоянный множитель в (59) значительно больше единицы, так как учтено много составляющих компонент в ковариации (Хинце, 1963), и равняется 15.

В табл. 1 представлены начальные данные для всех численных расчетов, проведенных в этой работе. Диапазоны изменения параметров подобия имеют следующие границы: для числа Маха  $M_s \in [0, 2; 1]$ , для гидродинамического числа Рейнольдса  $Re \in [100; 1580]$  и для магнитного числа Рейнольдса  $Re_m \in [2; 20]$ . Левая граница для  $Re$  выбрана таким образом, чтобы обеспечить режим развитой турбулентности, а правая — компромисс между получением адекватных результатов DNS и необходимостью проведения сравнительного анализа с подсеточными моделями LES. Для магнитного числа Рейнольдса величина правой

**Таблица 1.** Начальные параметры для изучения МГД-сжимаемой турбулентности:  $\lambda$  — тейлоровский микромасштаб;  $Re_\lambda$  — тейлоровское число Рейнольдса;  $Re$  — гидродинамическое число Рейнольдса;  $Re_m$  — магнитное число Рейнольдса;  $M_s$  — число Маха;  $M_a$  — альфвеновское число Маха;  $\kappa$  — колмогоровский масштаб;  $\mu$  — коэффициент молекулярной диссипации;  $\gamma$  — показатель политропы;  $U$  — среднеквадратичное значение скорости;  $\beta$  — среднеквадратичное значение магнитного поля

Номер случая	$\lambda$	$Re$	$Re_m$	$Re_\lambda$	$M_s$	$M_a$	$\kappa$	$\mu$	$\gamma$	$U$	$\beta$
1	0,843	390	10,0	50	0,6	0,6	0,077	0,01	5/3	0,608	0,246
2	0,843	100	10,0	25	0,6	0,6	0,108	0,02	5/3	0,608	0,246
3	0,843	1580	10,0	100	0,6	0,6	0,054	0,005	5/3	0,608	0,246
4	0,843	390	2,0	50	0,6	0,6	0,077	0,01	5/3	0,608	0,246
5	0,843	390	20,0	50	0,6	0,6	0,077	0,01	5/3	0,608	0,246
6	0,843	390	10,0	50	0,2	0,6	0,077	0,01	5/3	0,608	0,246
7	0,843	390	10,0	50	1	0,6	0,077	0,01	5/3	0,608	0,246

границы рассматриваемого интервала обусловлена тем, что в данной работе мы исследуем затухающую сжимаемую МГД-турбулентность, а при увеличении  $Re_m$  повышается вероятность возникновения динамопроцессов в трехмерном течении заряженной жидкости. Левая же граница для  $Re_m$  обуславливается выраженной ролью магнитных эффектов в МГД-течении. Ограниченность числа Маха единицей определяется приближением политропности газа, принятым в настоящей работе. Течения, соответствующие значению числа Маха меньше 0,2, не представляют интереса с точки зрения изучения сжимаемых течений.



**Рис. 1.** Временная эволюция тейлоровского микромасштаба для различных случаев

Результаты численных экспериментов, проведенных методом DNS, представлены на рис. 1–3. На рис. 1 изображена временная эволюция тейлоровского микромасштаба турбулентности. Изменение со временем при прямом численном моделировании тейлоровского числа Рейнольдса  $Re_\lambda$  и гидродинамического числа Рейнольдса  $Re$  приведено на рис. 2. На рис. 1 и 2 виден небольшой переходной интервал между  $t = 0$  и  $t = 0,02$ , что соответствует незначительному увеличению тейлоровского микромасштаба  $\lambda$  и числа Рейнольдса  $Re_\lambda$  перед их

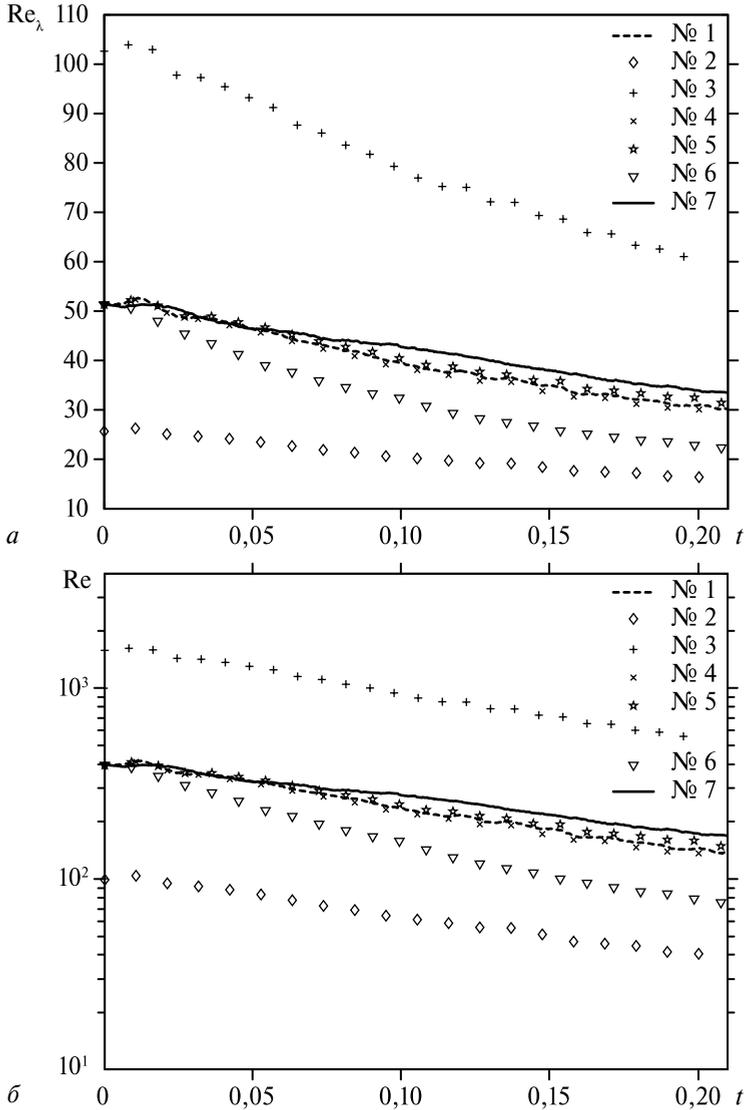


Рис. 2. Эволюция тейлоровского числа Рейнольдса (а) и гидродинамического числа Рейнольдса (б)

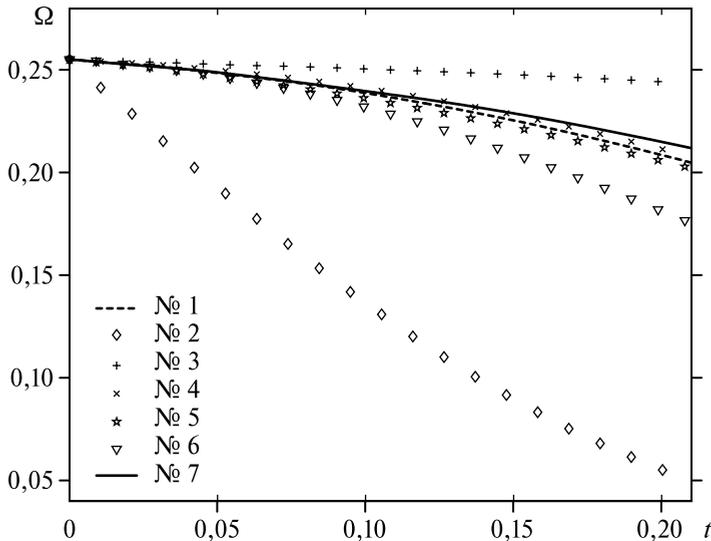


Рис. 3. Временная эволюция энтропии

монотонным убыванием. Это не связано с реальным физическим поведением затухающей турбулентности, а является результатом эволюции начального распределения скорости к действительному физическому турбулентному распределению скорости. Данный эффект обусловлен тем, что начальная скорость удовлетворяет уравнениям сохранения, но тем не менее она имеет стохастическую часть, поэтому в начальный момент и последующий кратковременный промежуток времени поле скорости не соответствует физическому течению.

Временная динамика интенсивности завихренности течения, определяемая изменением энтропии  $\Omega = \omega^2/2$  (где  $\omega = \nabla \times u$  — завихренность), показана на рис. 3. Как и следовало ожидать, видно, что самая большая диссипация наблюдается для случая, когда вязкость наибольшая. Наименьшая диссипация энтропии соответствует случаю № 3 (см. табл. 1), так как в этих расчетах использовалось наименьшее значение молекулярной вязкости.

### 1.5.2. Метод крупных вихрей

В этом разделе приведены результаты расчетов сжимаемых МГД-течений методом LES с использованием различных подсеточных параметризаций. Произведен анализ на основе сравнения полученных результатов LES с результатами численных экспериментов, выполненных прямым численным моделированием для случаев, представленных в табл. 1.

Метод LES реализован для пяти подсеточных моделей, сформулированных в предыдущих разделах. Все параметризации, использованные в данной работе, приведены в табл. 2, где для удобства введены следующие обозначения. Обозначение M0 соответствует случаю, когда подсеточные тензоры  $\tau_{ij}^a$  и  $\tau_{ij}^b$

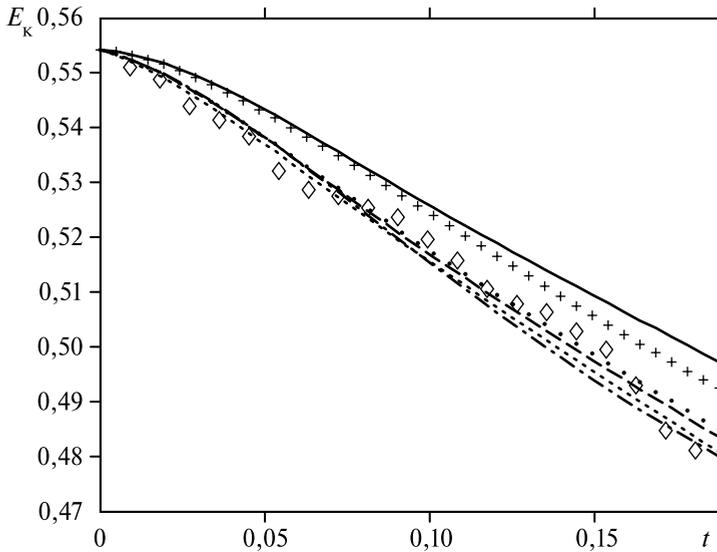
опущены, т. е. LES фактически является DNS на грубой LES-сетке. Вариант M0 (сплошная линия) представлен здесь для более полного анализа и понимания влияния подсеточных замыканий на моделирование МГД-течения при сравнении DNS-результатов с SGS-моделями (M1–M5). Обозначение M1 соответствует модели Смагоринского (штриховая линия) для МГД-течения, M2 — расширенная модель Колмогорова для МГД (пунктирная линия), M3 — модель, основанная на взаимной спиральности магнитного поля и поля скорости (линия из черных точек), M4 — модель подобия масштабов (обозначена «+»), M5 — смешанная модель (штрихпунктирная линия) для МГД-случая. Третий столбец в табл. 2 описывает графическое отображение приводимых ниже результатов для соответствующих моделей. Для обозначения DNS-результатов используется линия из ромбов.

Таблица 2. Обозначение для подсеточных моделей

Модели	Подсеточная модель	Вид графика
1	2	3
M0	Без модели	сплошная линия —
M1	Модель Смагоринского	штриховая линия — —
M2	Модель Колмогорова	пунктирная линия - -
M3	Модель, основанная на перекрестной спиральности	линия из черных точек • •
M4	Модель подобия масштабов	линия из + +
M5	Смешанная модель	штрихпунктирная линия — - - -

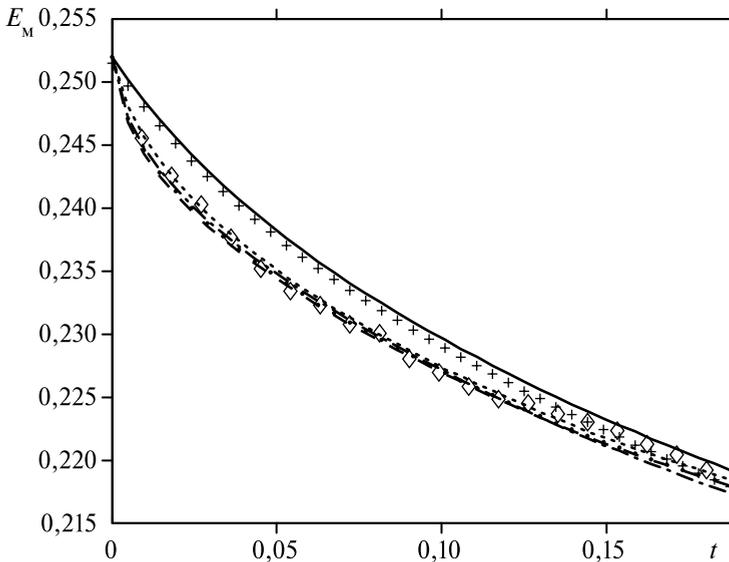
На рис. 4 и 5 показана временная эволюция кинетической  $E_k$  и магнитной  $E_m$  энергии соответственно для случая № 1. Основная цель подсеточных замыканий заключается в том, чтобы адекватно описать диссипацию энергии крупномасштабного движения. Как ожидалось, результаты M0 без подсеточных моделей оказываются наименее точными при сравнении с DNS-результатами. Как видно на рис. 4 и 5, модель M4 показывает наименее точные результаты по сравнению с другими подсеточными моделями. Особенно сильное отклонение можно наблюдать в начальные промежутки времени, как это видно на рис. 5 для магнитной энергии и на рис. 4 для кинетической энергии. Модель M4 демонстрирует нехватку диссипаций энергии на обоих рисунках (4 и 5), так же как и в гидродинамической турбулентности нейтральной жидкости (Ferziger, 1996). Другие подсеточные параметризации значительно улучшают точность вычислений.

Для магнитогидродинамики заряженной жидкости важными являются не только временная динамика магнитной и кинетической энергии, но и эволюция взаимной спиральности магнитного поля и поля скорости (рис. 6). Так же как и на рис. 4 и 5, на рис. 6 видно, что модели M0 и M4 являются менее точными. Другие модели обеспечивают хорошее согласование с DNS-результатами.



**Рис. 4.** Временная динамика кинетической энергии для случая № 1 (здесь и далее на рис. 5–24 для обозначений см. табл. 2)

Определим следующим образом флуктуирующие части: скорости —  $v_i = u_i - \langle \bar{\rho} u_i \rangle / \langle \bar{\rho} \rangle$  — и магнитного поля —  $b_i = B_i - \langle B_i \rangle$  — и сравним подсчетные модели с DNS-результатами для турбулентных напряжений. Скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по пространству. На рис. 7а показаны компоненты



**Рис. 5.** Временная динамика магнитной энергии для случая № 1

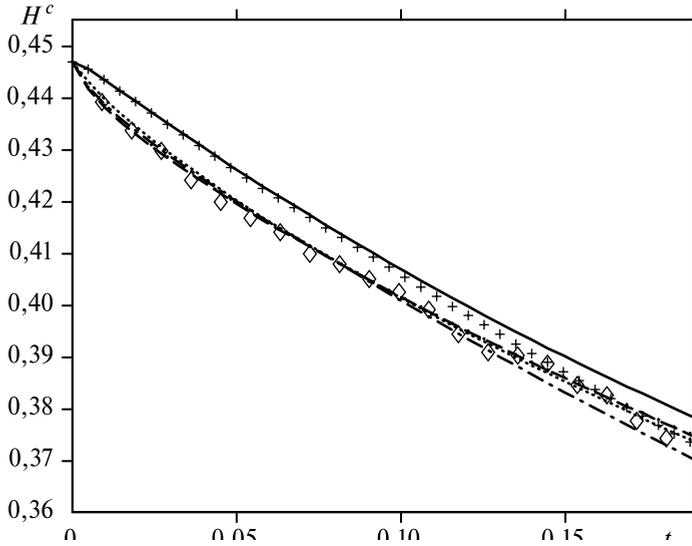


Рис. 6. Временная динамика взаимной спиральности для случая № 1

тензора турбулентного напряжения  $\langle \overline{\rho v_x v_z} \rangle$ , а на рис. 7б — изменение  $\langle \overline{\rho v_x v_x} \rangle$ . Видно, что турбулентное напряжение в DNS диссипирует более сильно, причем для  $\langle \overline{\rho v_x v_x} \rangle$  характерна сильная осцилляция (для наглядности на рис. 7в результаты DNS, обозначенные ромбами, соединены сплошной линией). Как и для энергии, M0 показывает наибольшее отклонение от DNS-результатов. На рис. 7б и 7г демонстрируются магнитные турбулентные напряжения  $\langle b_x b_z \rangle$  и  $\langle b_x b_x \rangle$  соответственно, в DNS-расчетах диссипация чуть меньше при увеличении времени вычисления, чем при применении LES. После  $t = 0,1$  модель M2 оказывается менее всего диссипативной для магнитных турбулентных напряжений, даже меньше, чем для M0.

Для понимания структуры, статистических свойств турбулентного МГД-течения важными параметрами являются асимметрия и пологость турбулентного течения, которые характеризуют анизотропию рассматриваемого движения жидкости. Асимметрия и пологость для компонент скорости определяются как:

$$S_{u_j} = \frac{\langle u_j^3 \rangle}{\left( \langle u_j^2 \rangle \right)^{3/2}}, \quad K_{u_j} = \frac{\langle u_j^4 \rangle}{\left( \langle u_j^2 \rangle \right)^2}. \quad (61)$$

Асимметрия и пологость для магнитного поля будет соответственно:

$$S_{b_j} = \frac{\langle B_j^3 \rangle}{\left( \langle B_j^2 \rangle \right)^{3/2}}, \quad K_{b_j} = \frac{\langle B_j^4 \rangle}{\left( \langle B_j^2 \rangle \right)^2}. \quad (62)$$

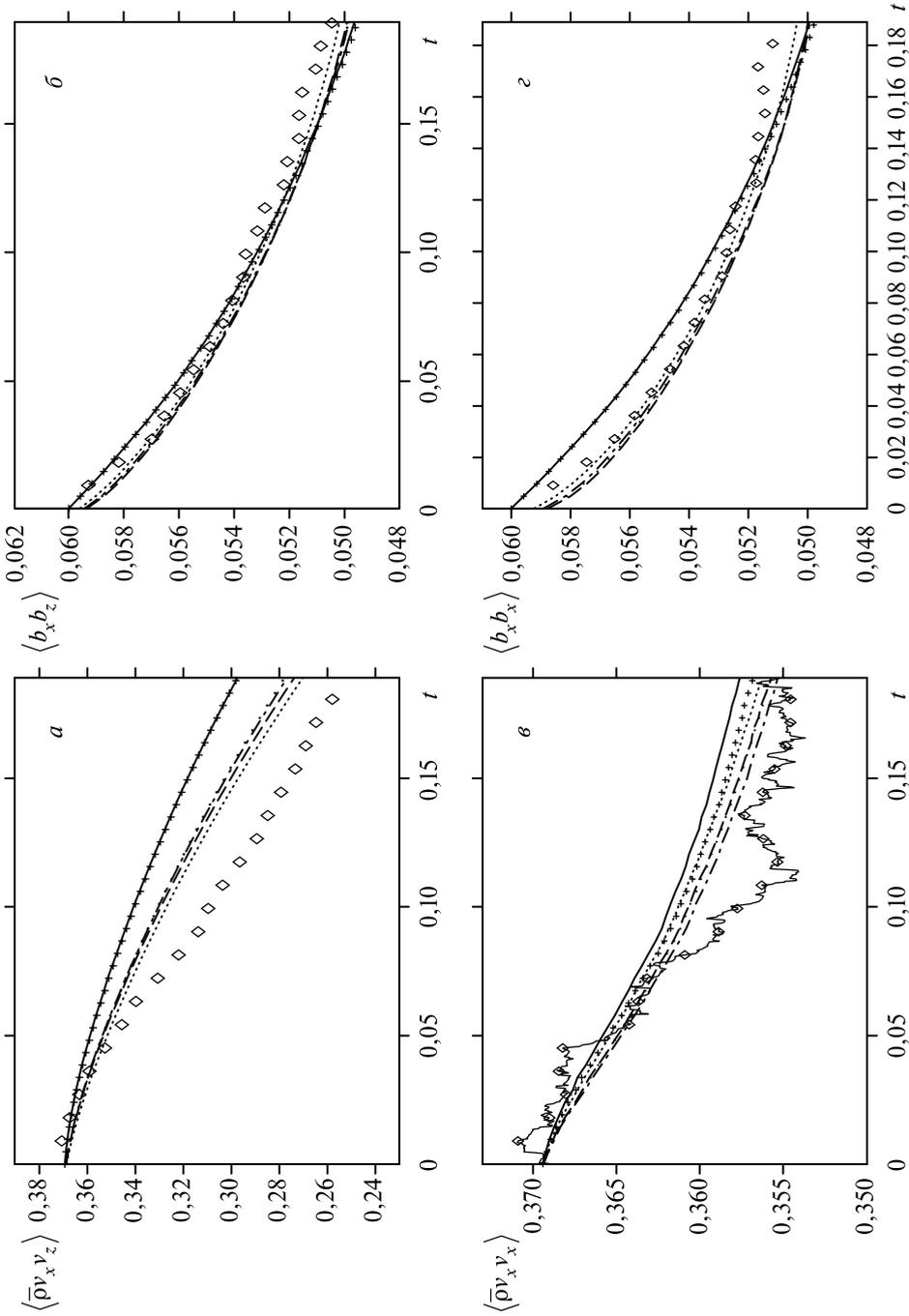


Рис. 7. Временная динамика турбулентных напряжений для случая № 1

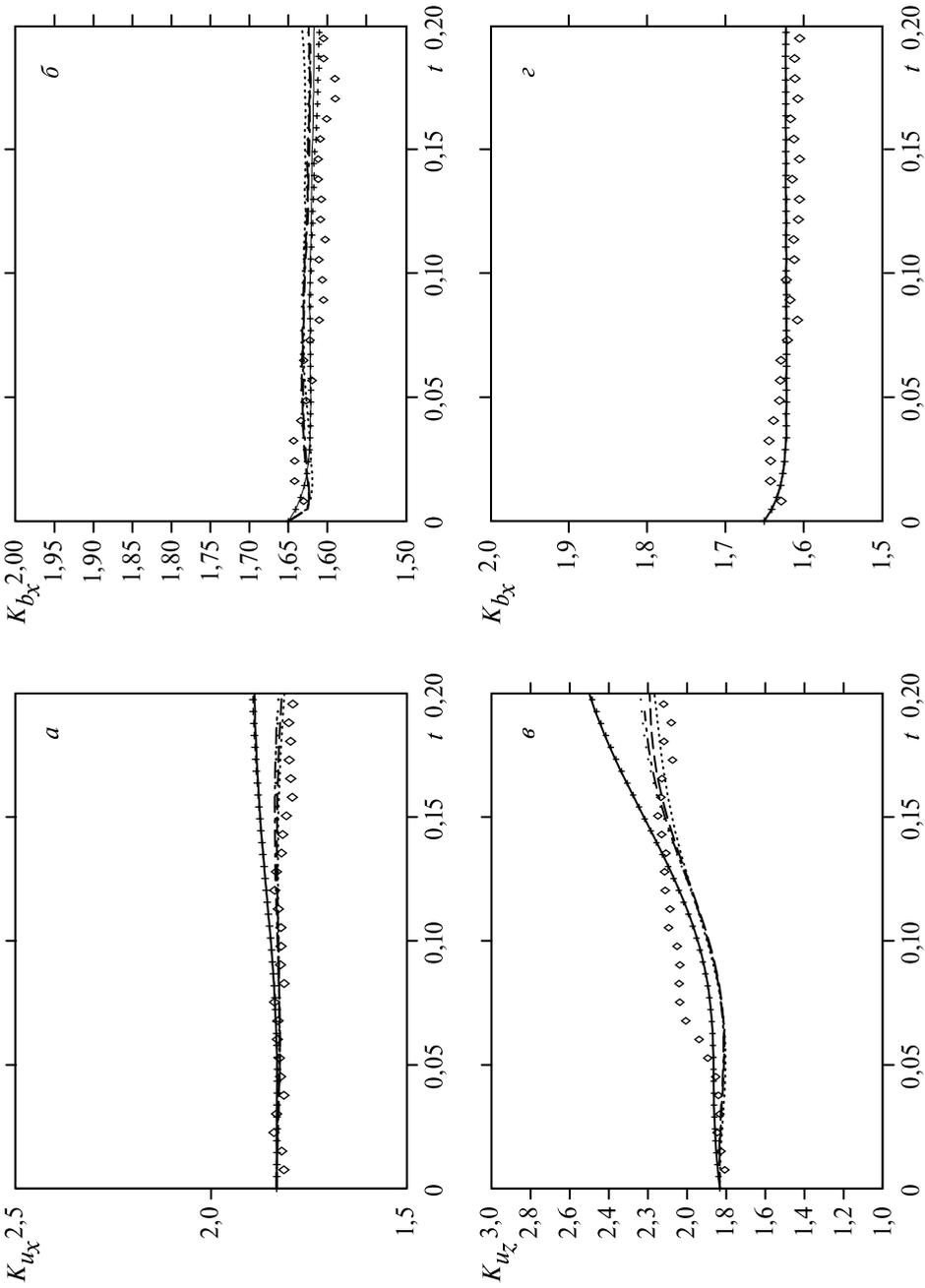


Рис. 8. Временная динамика пологости для случая № 1

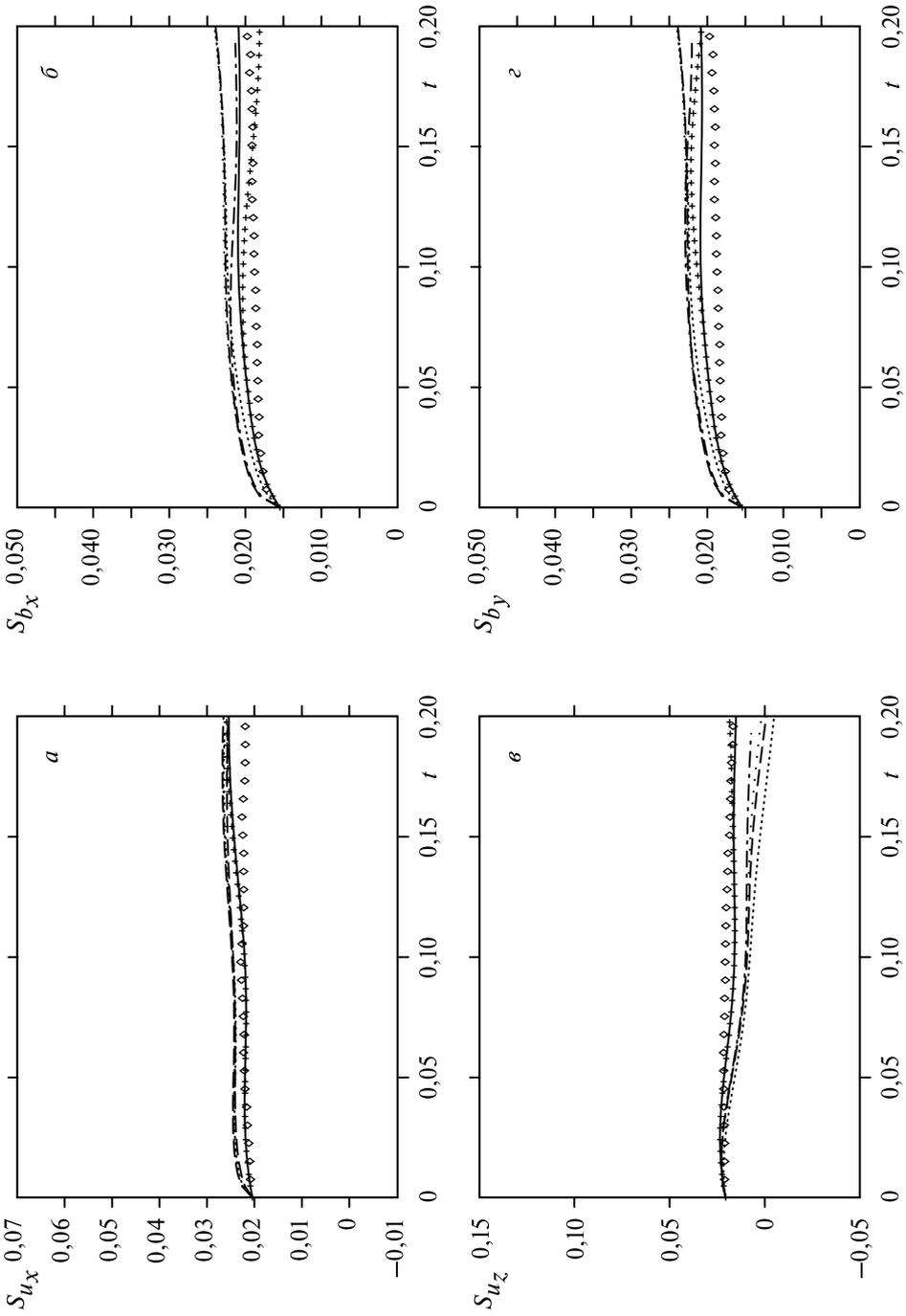


Рис. 9. Временная динамика асимметрии для случая № 1

На рис. 8 для пологости представлено сравнение различных подсеточных моделей LES с DNS. Если для магнитного поля разброс в результатах практически отсутствует и все модели практически совпадают с DNS, то для скорости влияние выбора подсеточной параметризации оказывается более существенным. Модели M0 и M4 демонстрируют самое большое отклонение от DNS. На рис. 9 приведена временная эволюция асимметрии. Интересно заметить, что асимметрия магнитного поля  $S_{b_x}$  и  $S_{b_y}$  (см. рис. 9б, 9г) и скорости  $S_{u_x}$  и  $S_{u_z}$  (рис. 9а, в) для моделей M0 и M4, наоборот, оказываются ближе к результатам DNS.

На рис. 10а показана молекулярная диссипация  $\varepsilon_\mu = 2\mu \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}$ , которая всегда положительна. На рис. 10б представлено временное изменение подсеточной кинетической диссипации, определенное как  $\chi_u = -\tau_{ij}^u \tilde{S}_{ij}$ , при этом фильтрованная кинетическая энергия уменьшается при  $\chi_u > 0$  и возрастает при  $\chi_u < 0$  (соответствует обратному каскаду энергии). Значение  $\chi_u$  определяет количество энергии, переносимое от крупномасштабной части к подсеточным масштабам, и  $\chi_u$  зависит от SGS-модели, которая используется для нахождения подсеточного тензора  $\tau_{ij}^u$ . На рис. 10б подсеточная диссипация для M0 отсутствует, так как в этом случае не используется подсеточная параметризация. Как видно на рисунке, подсеточная диссипация для M4 до момента времени  $t = 0,13$  наименьшая, поэтому модель M4 не обеспечивает диссипацией должным образом кинетическую энергию, и на рис. 4 модель M4, как и M0, показывает наихудшие результаты. Нехватку подсеточной диссипации частично компенсирует тот факт, что, как следует из рис. 10а, молекулярные диссипации M4 и M0 имеют в начальный промежуток времени несколько большее значение, чем остальные модели. Самое большое значение подсеточной кинетической энергии имеют модели M2 и M5.

Магнитная молекулярная диссипация турбулентного поля показана на рис. 10в, она находится из соотношения  $\varepsilon_\eta = \eta |\bar{j}|^2$ . Магнитная подсеточная диссипация (рис. 10г) определяется как  $\chi_b = -\tau_{ij}^b \bar{j}_{ij}$  и также представляет собой крупномасштабное уменьшение энергии вследствие влияния подсеточных масштабов, причем прямой каскад энергии наблюдается при  $\chi_b > 0$  и обратный — при  $\chi_b < 0$ . Как и для кинетической энергии, молекулярная магнитная диссипация несколько больше для M0 и M4, зато магнитная подсеточная энергия намного меньше для M4, чем для остальных моделей (для M0 она, разумеется, равна нулю). Эти графики хорошо согласуются с графиком магнитной энергии рис. 5, где после  $t = 0,1$  разница между результатами DNS и различными SGS-замыканиями незначительна, и на графике рис. 10г после  $t = 0,1$  значение подсеточной магнитной диссипации для всех моделей почти одинаково и намного меньше, чем в начальной фазе вычислений.

Еще одним тестом для LES является спектральное распределение кинетической и магнитной энергии, которое характеризует перераспределение

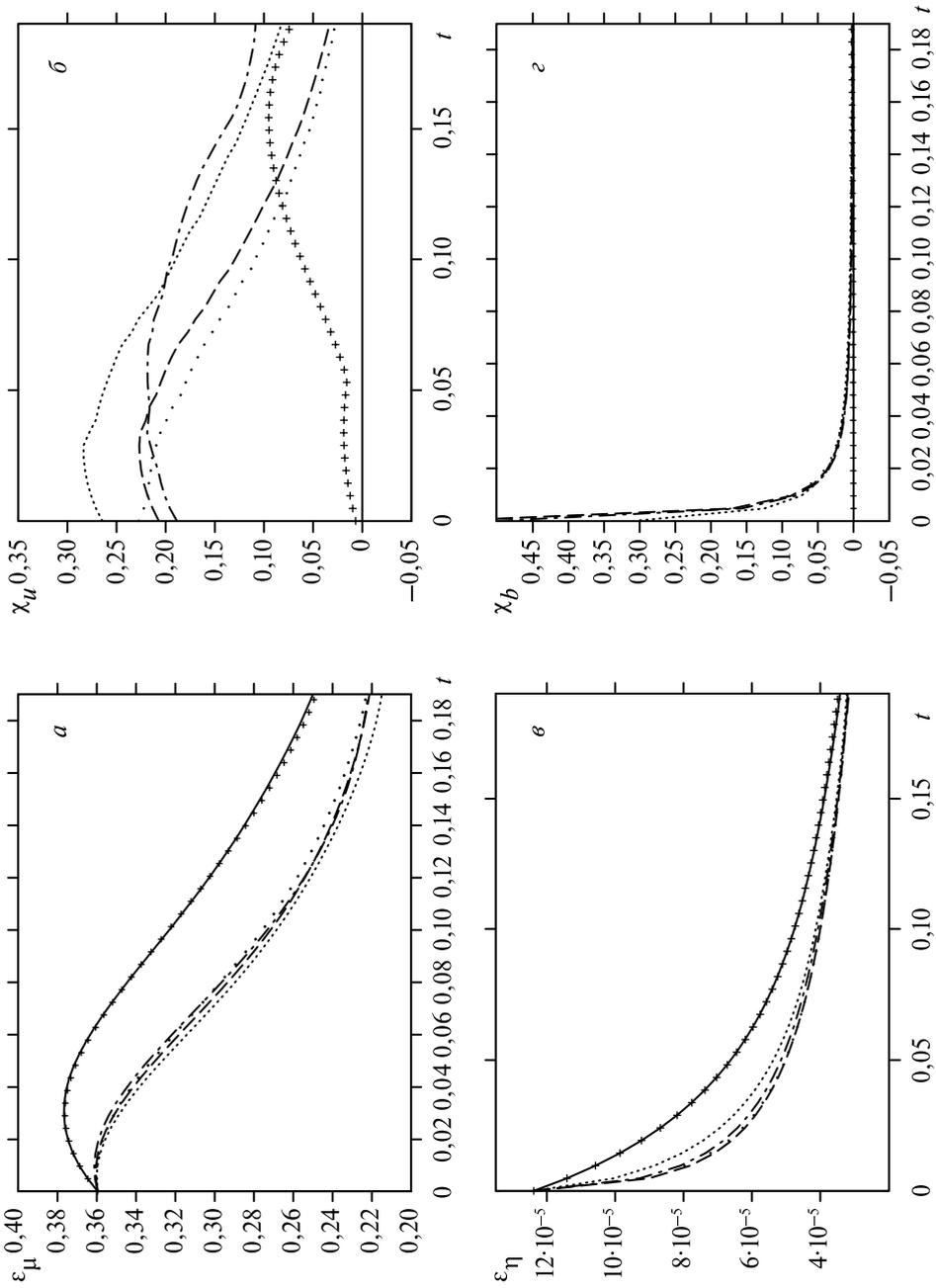


Рис. 10. Временная динамика диссипации для случая № 1

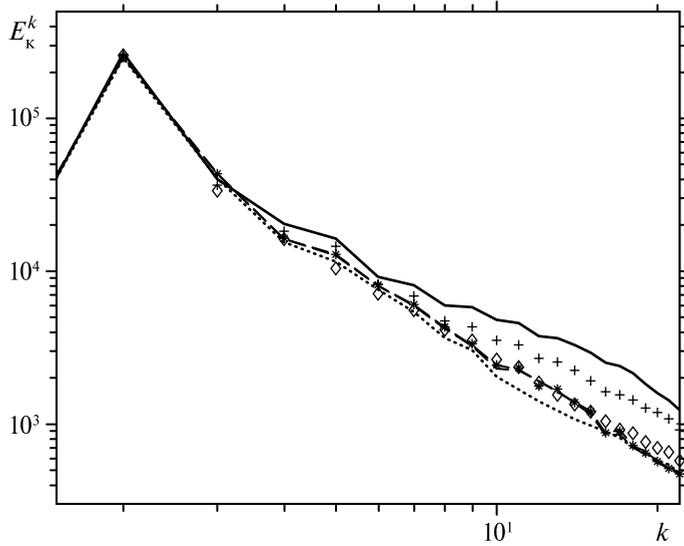


Рис. 11. Спектр кинетической энергии

энергии в зависимости от волнового вектора  $k$  (т. е. в зависимости от масштаба). Кроме того, спектр позволяет оценить влияние подсеточных замыканий при моделировании сжимаемого МГД-течения. На рис. 11 и 12 представлен спектр кинетической  $E_k$  и магнитной  $E_M$  энергии соответственно. Заметно, что на больших масштабах (что соответствует маленьким значениям волнового вектора) все графики почти совпадают и различия между подсеточными моделями практически отсутствуют, следовательно, наиболее крупные масштабы

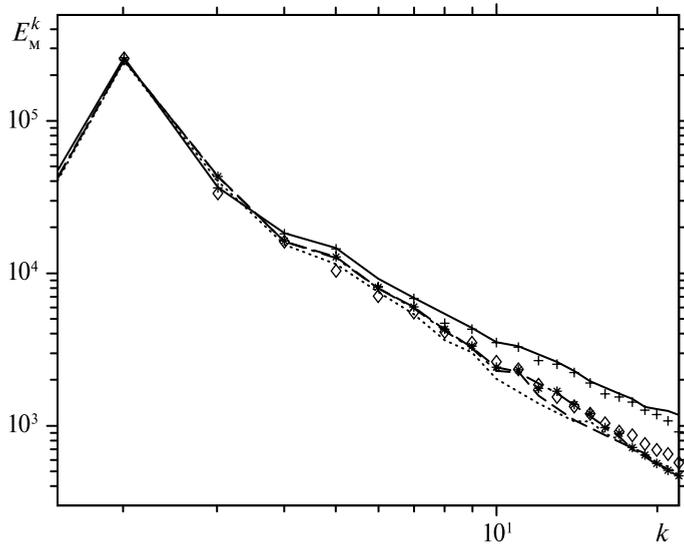


Рис. 12. Спектр магнитной энергии

турбулентности фактически не зависят от SGS-параметризаций. Различия проявляются главным образом на мелких масштабах (большие числа  $k$ ). В целом спектр энергий подтверждает ранее полученные результаты для подсеточных замыканий. Спектр DNS находится в хорошем соответствии с моделями M1, M2, M3 и M5, причем особенно с моделями M3 и M5. Кроме того, заметно, что моделирование с использованием M0 и M4 не обеспечивается достаточным количеством диссипации энергии, другими словами, для моделей M0 и M4 характерно скопление энергии для больших значений волнового вектора из-за нехватки диссипации. Данные выводы из спектрального распределения энергии подтверждают результаты, полученные при исследовании временной динамики кинетической и магнитной энергии.

Вычисления для случаев № 2 и 3 проводились с варьированием начальных значений молекулярной диссипации и соответственно числа Рейнольдса. Качественно графики ведут себя похожим образом (графики не приведены), это связано с тем, что начальное распределение магнитного поля, поля скоростей не изменялось, поэтому в нашей серии вычислительных экспериментов выбор подсеточной параметризации от тейлоровского числа Рейнольдса зависит слабо. Модели M1, M2, M3, M5 показывают адекватные результаты и улучшают точность вычислений. Несмотря на то что замыкание M4 не может использоваться как отдельная подсеточная модель для моделирования трехмерной сжимаемой МГД-турбулентности, в качестве смешанной модели совместно с моделью вихревой вязкости (например, с моделью Смагоринского, как это продемонстрировано в M5 (45), (46) дает удовлетворительные результаты.

При проведении расчетов для случаев № 4 и 5 изменялось значение магнитного числа Рейнольдса  $Re_m$ . В вычислениях в случае № 4 мы его уменьшили

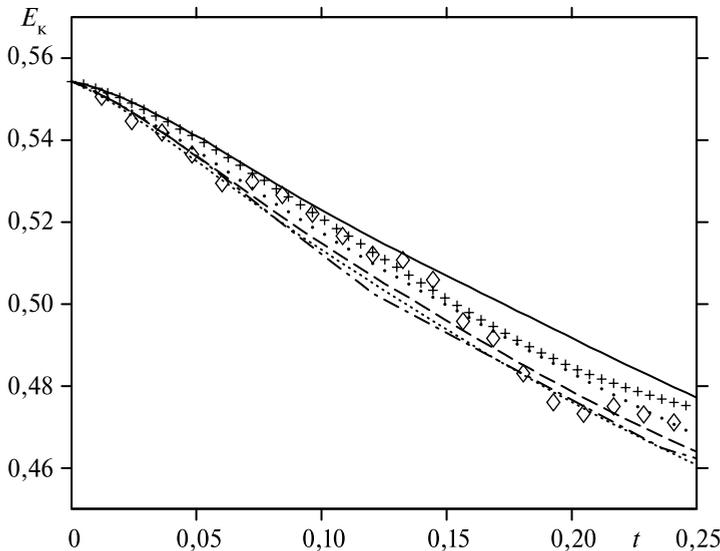
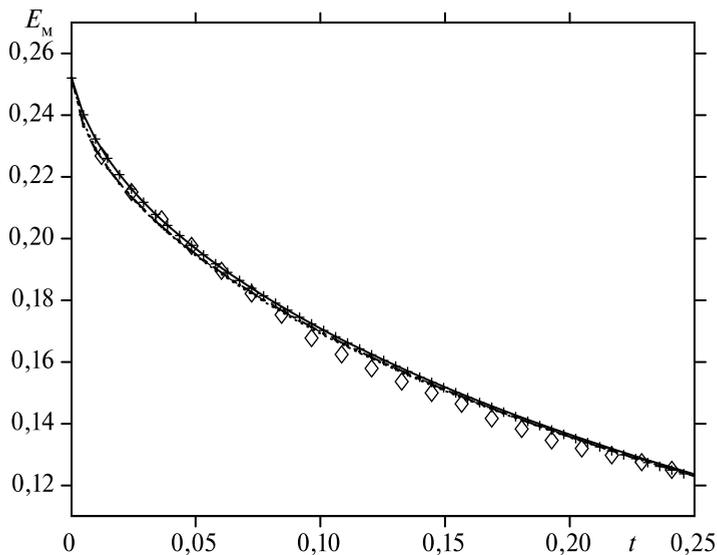
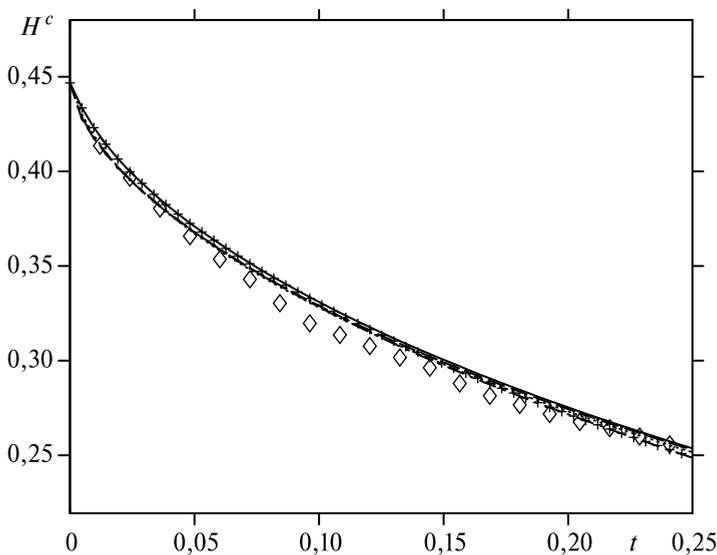


Рис. 13. Временная динамика кинетической энергии для случая № 4



**Рис. 14.** Временная динамика магнитной энергии для случая № 4

до значения  $Re_m = 2$ . Видно, что для временной эволюции кинетической энергии (рис. 13) по-прежнему модели M0 и M4 демонстрируют наибольшее отклонение от результатов DNS (правда, модель M4 не так сильно отклоняется, как в случае № 1). Однако для эволюции магнитной энергии (рис. 14) поведение графиков принципиально отличается, фактически все модели SGS совпадают с численными результатами DNS на мелкой сетке. На рис. 15 наблюдается почти



**Рис. 15.** Временная динамика взаимной спиральности для случая № 4

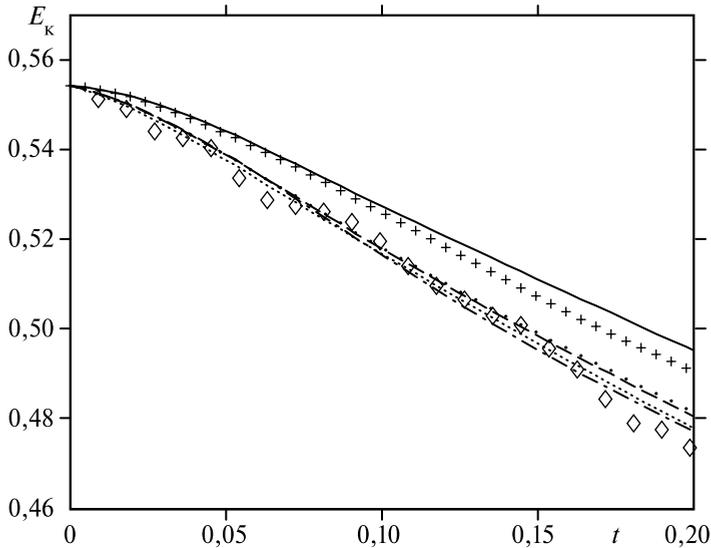


Рис. 16. Временная динамика кинетической энергии для случая № 5

полное совпадение результатов DNS с результатами LES в нашей работе для взаимной спиральности магнитного поля и скорости. Как следствие, для магнитной турбулентной напряженности различий между пятью подсеточными параметризациями и DNS почти нет (графики не приведены).

Теперь более детально рассмотрим случай № 5, в котором при вычислении использовалось магнитное число Рейнольдса, равное  $Re_m = 20$ . На рис. 16 и 17

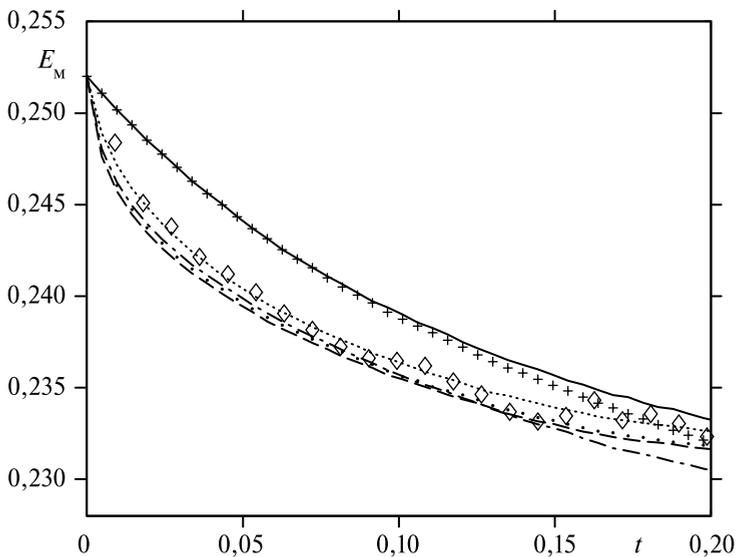


Рис. 17. Временная динамика магнитной энергии для случая № 5

показана временная эволюция кинетической и магнитной энергии. Из рис. 17, изображающего временное изменение магнитной энергии, видно, что случай № 5 сильно отличается от случаев № 1 и 4. При увеличении магнитного числа Рейнольдса различия в результатах при применении той или иной подсеточной параметризации увеличивается (см. рис. 14). Как и ранее, наилучшие результаты наблюдаются при использовании моделей M1, M2 и M3. Модель M5 после  $t = 0,15$  слабо совпадает с DNS, в то время как M4, напротив, начинает достаточно диссипировать энергию, но в целом эти модели не очень хорошо подходят для моделирования сжимаемого турбулентного МГД-течения. На рис. 16 для кинетической энергии можно отметить, что различия между результатами DNS и M0, когда нет никакой подсеточной параметризации, больше, чем для численных экспериментов № 5 и 1. То есть при увеличении магнитного числа Рейнольдса роль SGS-замыканий возрастает. Рисунок 18 представляет эволюцию взаимной спиральности со временем, из которой следует, что наличие адекватной SGS-параметризации увеличивает точность вычисления. Модели M0 и M4 дают худшие результаты.

Для асимметрии и пологости компонент скорости и магнитного поля видно, что все модели хорошо согласуются с результатами DNS. Интересно заметить, что для данного рассматриваемого случая при  $Re_m = 20$  результаты LES, характеризующие статистические свойства и анизотропию течения, намного лучше совпадают с DNS, чем для случая № 4, где  $Re_m = 2$  (графики не приведены).

Стоит отметить, что при увеличении магнитного числа Рейнольдса  $Re_m$  кинетическая энергия уменьшается сильнее, а магнитная энергия, наоборот, слабее, такие же результаты были отмечены в работе (Ladeinde, Gaitonde, 2004),

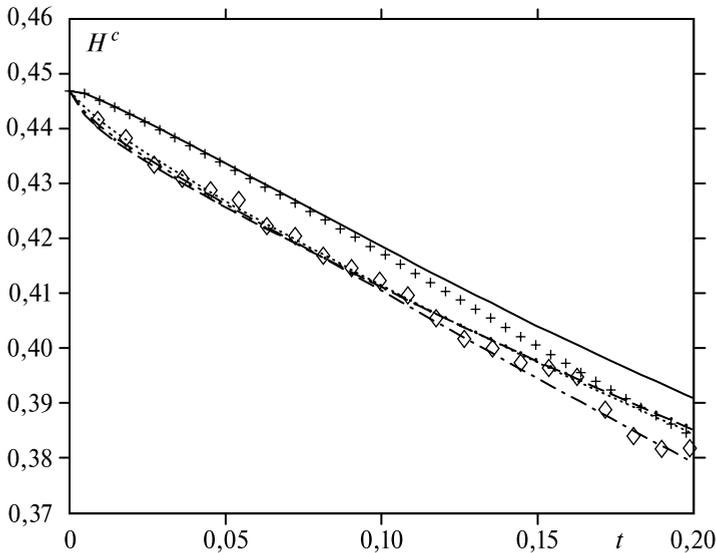


Рис. 18. Временная динамика взаимной спиральности для случая № 5

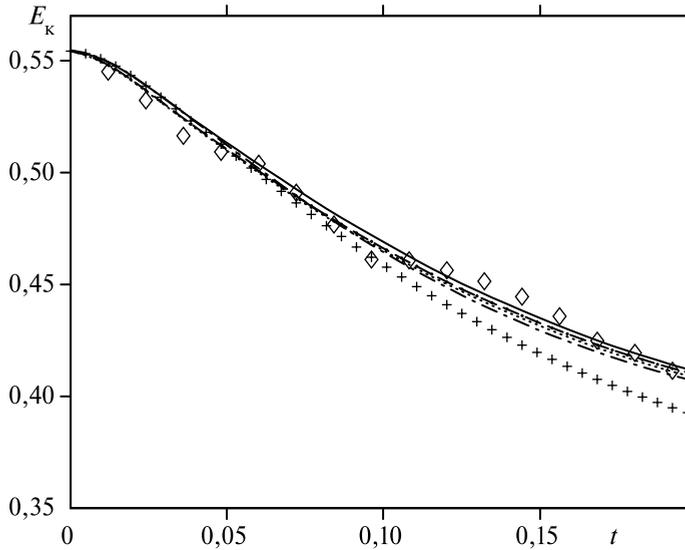


Рис. 19. Временная динамика кинетической энергии для случая № 6

где исследовалось влияние  $Re_m$  на двумерную МГД-турбулентность методом DNS.

Теперь рассмотрим сжимаемую МГД-турбулентность для различных значений чисел Маха. Сначала рассмотрим случай № 6, когда число Маха невелико  $M_s = 0,2$ , т. е. течение слабо сжимаемое. При этих условиях эволюция кинетической энергии (рис. 19) ведет себя таким образом, что различия между SGS-

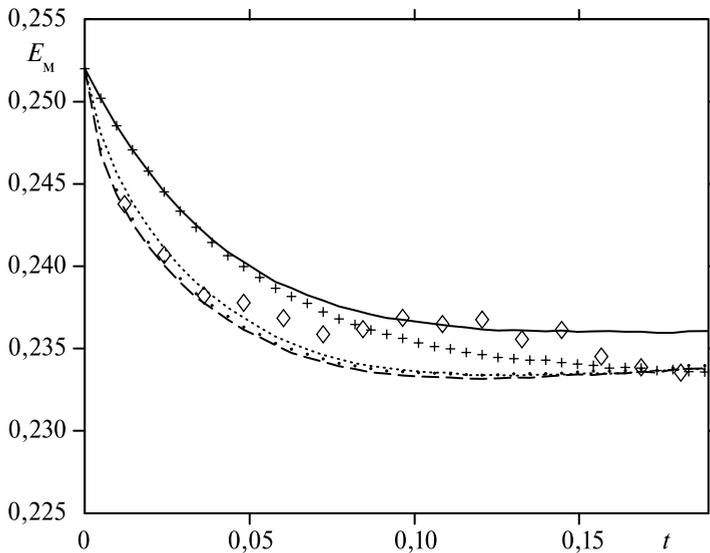


Рис. 20. Временная динамика магнитной энергии для случая № 6

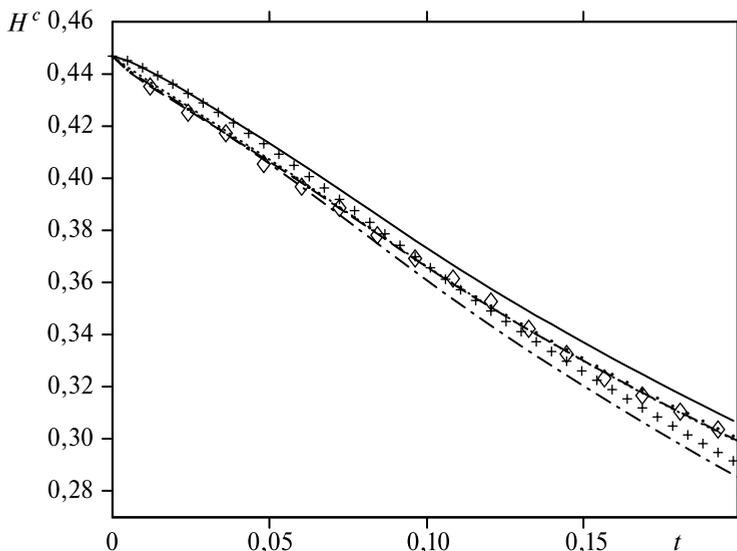


Рис. 21. Временная динамика взаимной спиральности для случая № 6

параметризациями и DNS меньше, чем было в ранее рассмотренных случаях. Наихудшие результаты показывает модель M4. На рис. 20 приведена временная динамика магнитной энергии — видно, что стационарный уровень достигается быстрее. В силу того что на показанном временном промежутке затухание турбулентности незначительно, результаты DNS имеют осцилляции возле стационара, очевидно, значительно большие, чем полученные с помощью LES, поскольку вычисления DNS выполняются на заметно более мелкой расчетной сетке. В связи с этим на некотором коротком промежутке времени результаты DNS даже чуть ближе к M0, чем к LES, но в целом результаты LES, а точнее, модели M1–M3 и M5 значительно повышают точность вычислений. Для взаимной спиральности (рис. 21) параметризации M1–M3 показывают наилучшее приближение к DNS-расчетам.

Последний случай (№ 7), который был рассмотрен в этой работе, соответствует звуковым течениям для числа Маха  $M_s = 1$ .

Для таких течений различия между DNS-результатами и M0 особенно заметны для кинетической энергии (рис. 22). Следовательно, влияние SGS-моделей на точность вычислений увеличивается. Лучше всего работают в этих условиях SGS-модели M1, M3 и M5. Подсеточная модель M4, как и раньше, дает наихудшие результаты и не обеспечивает достаточной диссипацией кинетическую энергию, в то время как модель M2 приводит к чрезмерной диссипации.

А вот для магнитной энергии рис. 23 наблюдается обратная тенденция и роль подсеточных параметризаций уменьшается, так как видно, что разница между M0 и DNS-результатами меньше, чем при вычислениях с числом Маха  $M_s = 0,2$  и  $M_s = 0,6$ . Модели M1–M3 и M5 дают хорошее совпадение с расчетами DNS для магнитной энергии. Для временной эволюции взаимной спиральности

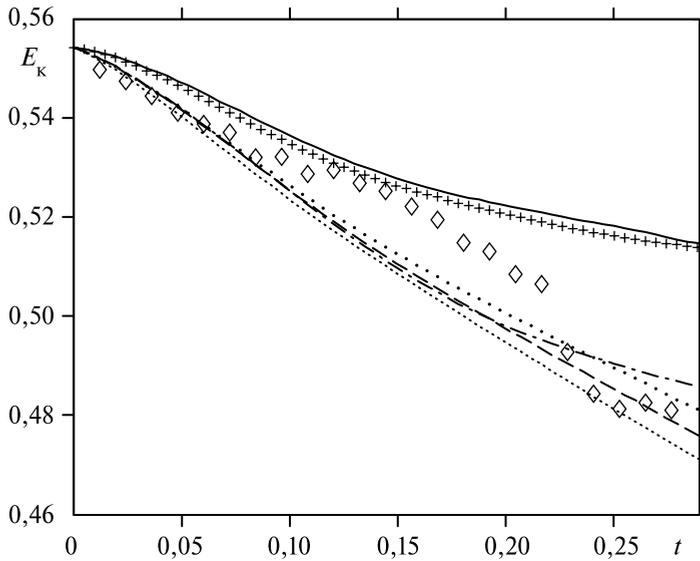


Рис. 22. Временная динамика кинетической энергии для случая № 7

в случае № 7 (рис. 24) наилучшие результаты из подсеточных замыканий демонстрирует модель M1.

Для турбулентных напряжений отличия результатов различных моделей увеличиваются. Такой же вывод был сделан ранее для временной эволюции кинетической энергии. Причем для  $\langle \bar{\rho} v_x v_x \rangle$  модели M4 и M0 ведут себя прин-

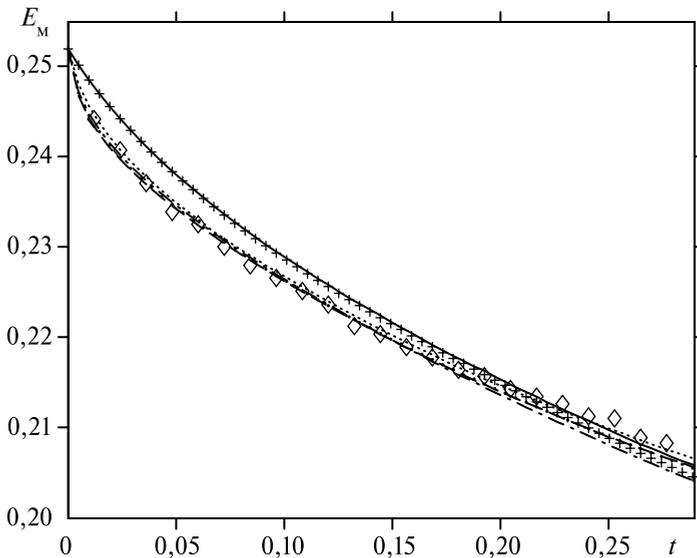


Рис. 23. Временная динамика магнитной энергии для случая № 7

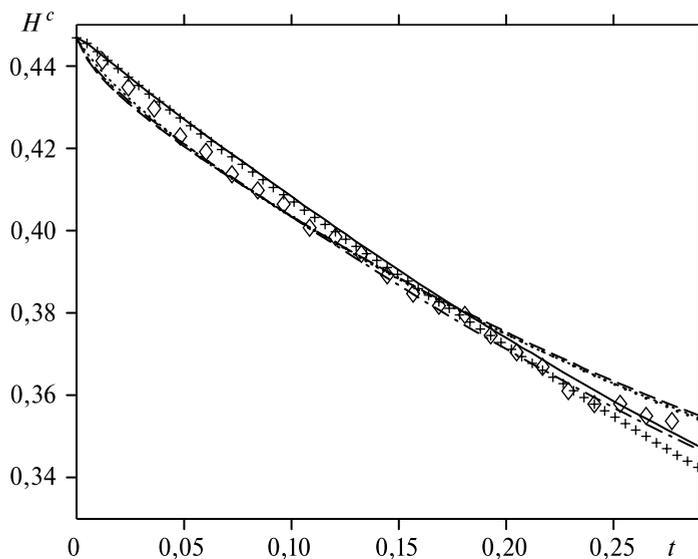


Рис. 24. Временная динамика взаимной спиральности для случая № 7

ципиально неверно, результаты DNS сильно осциллируют. Увеличение амплитуды и частоты осцилляций связано с существенной сжимаемостью течения. Лучшие результаты показывает модель M2. Для магнитных турбулентных напряжений различия между всеми расчетами небольшие (не показано).

### Выводы

В данном разделе метод LES применен для моделирования сжимаемой затухающей МГД-турбулентности при различных числах подобия. Проведены численные исследования пяти подсеточных параметризаций: модель Смагоринского; модель Колмогорова; модель, основанная на взаимной спиральности скорости и магнитного поля; модель подобия масштабов и смешанная модель.

Показано, что при уменьшении магнитного числа Рейнольдса разница между подсеточными моделями уменьшается для магнитной энергии и все рассмотренные модели демонстрируют хорошее согласование с результатами DNS при малых значениях числа  $Re_m$ . При увеличении числа Рейнольдса растет роль подсеточных замыканий в моделировании сжимаемой МГД-турбулентности и уменьшается скорость диссипации магнитной энергии. Наилучшие результаты показывают модели Смагоринского, Колмогорова и модель, основанная на взаимной спиральности для эволюции магнитной энергии. Такое же поведение наблюдается и для взаимной спиральности: роль подсеточных параметризаций растет при увеличении  $Re_m$ . Для кинетической энергии при уменьшении магнитного числа Рейнольдса наблюдается большее расхождение в результатах LES при применении различных SGS-параметризаций. Модель подобия масштабов показывает наихудшие результаты, остальные SGS-замыкания увеличивают

точность расчетов. Для временной динамики турбулентных напряжений, как магнитных, так и кинетических, характерно увеличение влияния на результаты моделирования МГД-турбулентности SGS-параметризации при увеличении  $Re_m$ . Роль анизотропии в расчетах и расхождение LES- и DNS-результатов для анизотропии увеличивается при уменьшении магнитного числа Рейнольдса.

При изменении числа Рейнольдса  $Re_\lambda$  результаты расчетов ведут себя качественно похожим образом, это связано с тем, что начальные условия для магнитного поля, поля скоростей не изменялись, поэтому в наших вычислениях влияние на выбор подсеточной параметризации от тейлоровского числа Рейнольдса слабое. Подсеточные модели Смагоринского, Колмогорова, смешанная и модель, основанная на взаимной спиральности скорости и магнитного поля, показывают адекватные результаты и хорошее приближение к DNS-результатам.

Число Маха  $M_s$  оказывает существенное влияние на результаты вычислений. При увеличении  $M_s$  увеличивается расхождение в результатах DNS и LES для кинетической энергии. Модель Смагоринского и модель, основанная на взаимной спиральности, для кинетической энергии показывают наилучшее согласование с DNS при различных числах Маха. Для магнитной энергии, наоборот, наблюдается уменьшение разброса в результатах при увеличении  $M_s$ . Следует заметить, что при уменьшении числа Маха магнитная энергия быстрее выходит на стационарный уровень. Для взаимной спиральности магнитного поля и скорости модель Смагоринского показывает лучшие результаты как для высоких чисел Маха, так и для низких. Асимметрия компонент скорости, рассчитанная с использованием LES, лучше совпадает с результатами DNS при увеличении  $M_s$ . На асимметрию компонент магнитного поля выбор SGS параметризации практически не оказывает влияния. При увеличении числа Маха турбулентные напряжения, рассчитанные при помощи LES, лучше согласуются с результатами DNS.

В общем случае подсеточные модели меньше всего оказывают влияние на временную эволюцию пологости и асимметрии (модель без подсеточных замыканий также демонстрирует сравнительно хорошее согласование с DNS-результатами), это связано с тем, что анизотропия и перемежаемость являются свойствами крупномасштабных структур, а различия между SGS-моделями и моделью без подсеточных замыканий имеют место на мелких масштабах турбулентного течения.

В целом наилучшие результаты демонстрируют расширенная модель Смагоринского для МГД-случая и модель, основанная на взаимной спиральности магнитного поля и поля скоростей. Модель подобия масштабов не обеспечивает достаточной диссипацией кинетическую и магнитную энергию, и эту модель следует использовать только вместе с моделями вихревой вязкости (например, с моделью Смагоринского), что является основной идеей смешанной модели.

Таким образом, метод LES имеет хорошие перспективы для исследования сжимаемой магнитогидродинамической турбулентности.

## 2. УСТАНОВЛЕНИЕ СЛАБО СЖИМАЕМОГО РЕЖИМА В МГД-ТУРБУЛЕНТНОСТИ КОСМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ И СВОЙСТВА ТУРБУЛЕНТНОСТИ ЛОКАЛЬНОЙ МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЫ

В данном разделе исследуется сжимаемая МГД-турбулентность в космической плазме методом крупных вихрей для решения системы уравнений магнитной гидродинамики. Результаты, полученные в этой главе, используются для интерпретации турбулентных сжимаемых МГД-течений локальной межзвездной среды (*Chernyshov et al.*, 2008c).

Настоящий раздел организован следующим образом. В параграфе 2.1 представлены магнитогиродинамическая модель локальной межзвездной среды и параметры численного моделирования; параграф 2.2 посвящен анализу полученных результатов моделирования МГД-турбулентности и их теоретическому обоснованию, а именно изучаются свойства сжимаемости среды, спектры плотности и энергии, динамика намагниченности плазмы и анизотропия турбулентности локальной межзвездной среды. Заключение и выводы представлены в конце раздела.

### 2.1. МГД-модель и численное исследование локальной межзвездной среды

В этом параграфе представлена МГД-модель локальной межзвездной среды и характерные величины, использующиеся при численном моделировании сжимаемой МГД-турбулентности с помощью метода крупных вихрей.

Межзвездная среда — это вещество и поля, наблюдаемые в пространстве между звездами внутри галактик. Лишь сравнительно недавно удалось доказать, что звезды существуют не в абсолютной пустоте и что космическое пространство не вполне прозрачно. Межзвездная среда нашей галактики, непосредственно примыкающая к Солнечной системе, является локальной (местной) межзвездной средой. Межзвездная среда нашей Галактики оказывает сильное влияние на Солнечную систему. Параметры газа среды во многом определяют структуру гелиосферы или области, заполненной солнечным ветром.

Сильноионизированный газ в космических условиях находится в непрерывном движении, которое носит нерегулярный характер. Даже если имеется регулярное движение (например, дифференциальное вращение, солнечный/звездный ветер, аккреция), то на него накладываются флуктуации. При таком движении скорость представляет собой случайное поле, ее величина и направление меняются хаотичным образом. Распространенность турбулентности в космических условиях, а именно в межзвездной среде, связана в первую очередь с тем, что число Рейнольдса  $Re$  очень велико вследствие огромных размеров большинства космических объектов. При  $Re \gg 1$  движения неустойчивы, они распадаются на вихри, которые в свою очередь дробятся на более мелкие вихри и т. д. Кроме того, важнейшей особенностью турбулентности в космических условиях является наличие в ней случайных магнитных полей наряду со случайными значениями скорости.

При достаточно мощном источнике энерговыделения, когда скорость движения вещества превышает скорости распространения любых линейных возмущений в рассматриваемой среде (т. е. звуковую и альфеновскую скорости), турбулентность становится сверхзвуковой. Исследования межзвездной среды на космических аппаратах показали, что в межзвездной плазме существует МГД-турбулентность. Анализ наблюдательных данных (*Armstrong et al.*, 1995) дает степенную зависимость для спектров скорости и плотности, близкую к закону Колмогорова – Обухова (*Колмогоров*, 1941; *Обухов*, 1941). Основные источники энергии и импульса МГД-турбулентности в межзвездной среде — это крупномасштабные движения газа и звездной подсистемы, а также активные процессы в звездах и звездных скоплениях (*McLow*, 2004). Результаты спутниковых данных стали неожиданными, так как спектр колмогоровского типа  $k^{-5/3}$  был теоретически получен для несжимаемой гидродинамической среды, а межзвездная турбулентность является магнитогидродинамической и существенно сжимаемой, поэтому основная задача — понимание возникновения колмогоровского спектра для флуктуаций плотности и кинетической энергии в локальной межзвездной турбулентности.

Однако до сих пор динамика магнитогидродинамической турбулентности в локальной межзвездной среде остается одной из нерешенных проблем в физике и астрофизике. Решение данной задачи значительно усложняется тем, что межзвездная среда недоступна для непосредственного наблюдения и экспериментов, численные исследования МГД-турбулентности в космических масштабах ограничены современными вычислительными ресурсами, так как для таких процессов характерны очень большие числа Рейнольдса и, как следствие, числа степеней свободы турбулентного движения. Поэтому минимальное необходимое количество узлов на численной сетке должно быть столь огромным, что не позволяет исследовать турбулентность с достаточной точностью. Для такого рода течений удобно применить метод LES для сжимаемой МГД-турбулентности, разработанный и подробно рассмотренный ранее. Численный метод LES позволяет изучить физические процессы в рассматриваемом течении при  $Re \gg 1$ . Ранее LES никогда не применялся для исследования турбулентности в космических условиях, в частности межзвездной среды. В данном разделе впервые турбулентность в локальной межзвездной среде изучается методом LES, что позволило получить новые результаты о спектрах энергии МГД-турбулентности.

Статистически однородная изотропная плазма в локальной межзвездной среде может быть описана одножидкостной магнитогидродинамической моделью (*Shaikh, Zank*, 2007) в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j}; \quad (63)$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \sigma_{ij} + \frac{B^2}{8\pi} \delta_{ij} - \frac{1}{4\pi} B_j B_i \right); \quad (64)$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_j} (u_j B_i - u_i B_j) + \eta \frac{\partial^2 B_i}{\partial x_j^2}; \quad (65)$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial x_i} = 0. \quad (66)$$

Данная МГД-система замыкается политропным соотношением, которое связывает плотность и давление. Обезразмеривая исходную систему уравнений (63)–(66), получим следующие числа подобия, характеризующие задачу:  $Re = \rho_0 u_0 L_0 / \mu_0$  — гидродинамическое число Рейнольдса;  $Re_m = u_0 L_0 / \eta_0$  — магнитное число Рейнольдса;  $M_s = u_0 / c_s$  — число Маха, где  $c_s$  — скорость звука, определяемая следующим соотношением:  $c_s = \sqrt{\gamma p_0 / \rho_0}$ ;  $M_a = u_0 / u_a$  — альфвеновское число Маха, где  $u_a = B_0 / (\sqrt{4\pi\rho_0})$  — альфвеновская скорость. Плазменная бета, отношение плазменного давления к давлению магнитного поля, определяется как:  $\beta_0 = 8\pi p_0 / B_0^2$ . Эти величины возникают после нормировки при обезразмеривании и связаны с крупномасштабными плазменными движениями. Также существуют турбулентные скорости, числа Маха и Рейнольдса, зависящие локально от мелкомасштабных структур и относительно высоких частотных флуктуаций. Крупномасштабное течение, или постоянное среднее фоновое течение, приводит, как правило, к постоянному значению числа Маха, в то время как локальные флуктуирующие вихри изменяют турбулентное число Маха, зависящее от локальных свойств мелкомасштабных турбулентных флуктуаций.

Определим скорость звука для мелкомасштабных турбулентных течений следующим образом:

$$\tilde{c}_s = \sqrt{\gamma} \rho^{(\gamma-1)/2} \quad (67)$$

и турбулентное звуковое число Маха:

$$\tilde{M}_s = \frac{\sqrt{\langle |u|^2 \rangle}}{\tilde{c}_s}. \quad (68)$$

Флуктуирующая альфвеновская скорость  $\tilde{u}_a = \tilde{B} / \sqrt{4\pi\tilde{\rho}}$ , следовательно, турбулентное альфвеновское число Маха записывается как

$$\tilde{M}_a = \frac{\sqrt{\langle |u|^2 \rangle}}{\tilde{u}_a}. \quad (69)$$

Здесь  $u_{rms} = \sqrt{\langle |u|^2 \rangle}$  является среднеквадратичной скоростью. Турбулентные числа Рейнольдса и плазменная бета  $\tilde{\beta}$  определяются аналогично. Заметим, что исследование эволюции локальных значений данных величин является важным для понимания флуктуаций характеристик турбулентного МГД-течения в локальной межзвездной среде.

Для изучения сжимаемой турбулентности в локальной межзвездной среде будем проводить трехмерное численное моделирование затухающей МГД-турбулентности, заданной замкнутой системой уравнений (63)–(66). Используемые здесь численные методы, схемы и алгоритмы были подробно описаны в параграфе 1.4. При исследовании локальной межзвездной турбулентности применим LES-метод для решения системы уравнений сжимаемой МГД (63)–(66), в качестве подсеточной параметризации применяем расширенную модель Смагоринского для МГД-случая, которая продемонстрировала достаточно точные результаты при различных числах подобия и подробно рассматривалась в разд. 1. Начальный изотропный турбулентный спектр для кинетической и магнитной энергии определяем в фурье-пространстве и выбираем близким к спектру  $k^{-2}$  со случайными амплитудой и фазами по всем трем направлениям. Выбор именно такого спектра в качестве начальных условий обусловлен тем, что возмущения скорости в фурье-пространстве аналогичны возмущениям в развитой турбулентности и поэтому могут быть использованы для моделирования развитой турбулентности в начальный момент времени (*McLow et al.*, 1998; *Porter*, 1992). Выбор спектра  $k^{-2}$  (спектр бюргесовской турбулентности) также определен физическими соображениями его быстрой сходимости к спектру  $k^{-3}$  посредством прямого каскада энергии в гидродинамической турбулентности (*Dastgeer, Zank*, 2004). К тому же разрывные ударные волны также будут иметь подобный энергетический спектр (вследствие фурье-преобразования ступенчатой функции), и фурье-преобразование разрывных волн не изменит данный спектр. Тем не менее большинство распределений со спектром  $k^{-2}$  не содержат ударных волн (*McLow et al.*, 1998). Затем, с использованием обратного преобразования Фурье, были получены начальные условия для скорости и магнитного поля. Расчетная область представляет собой трехмерный куб с линейными размерами  $\pi^3$ . Для получения результатов LES использовалась сетка с плотностью дискретизации  $64^3$ . Начальное гидродинамическое число Рейнольдса  $Re \approx 1000$ , а магнитное число Рейнольдса  $Re_m \approx 200$ . Число  $Re$  берется больше  $Re_m$  вследствие того, что в межзвездной среде могут возникать эффекты амбиполярной диффузии, что приводит к повышенному значению магнитной диффузии и, как следствие, к пониженной величине  $Re_m$  (*Biskamp*, 2003). Другие параметры, использовавшиеся при моделировании турбулентности локальной межзвездной среды: альфвеновское число Маха и звуковое число Маха  $M_a \approx M_s \approx 2,2$ , отношение теплоемкостей  $\gamma = 5/3$ , шаг по времени  $dt = 0,3 \cdot 10^{-3}$ . На всех границах расчетной области удовлетворялись периодические граничные условия. Небольшие изменения в начальных условиях не влияют качественно на результаты вычислений. Такие же выводы о слабом влиянии начальных параметров были сделаны в статье (*Shaikh, Zank*, 2007).

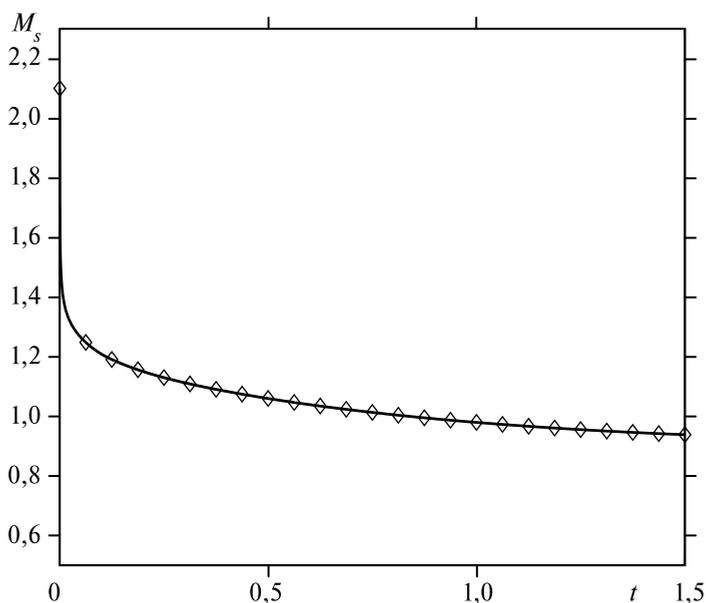
## **2.2. Анализ результатов моделирования и теоретическая интерпретация**

В данном параграфе представлены результаты расчетов сжимаемой магнито-гидродинамической турбулентности локальной межзвездной среды методом

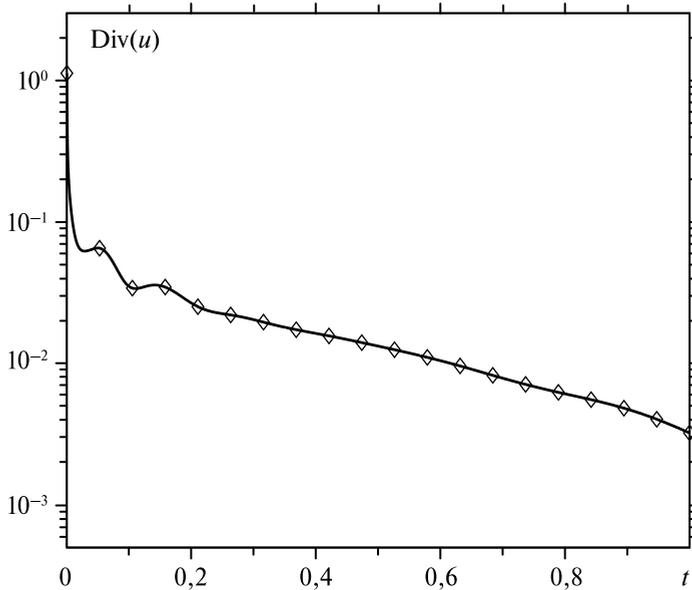
крупных вихрей. Численные результаты анализируются, и приводятся теоретические обоснования полученных результатов.

### 2.2.1. Свойства сжимаемости среды

Сжимаемая МГД-турбулентность эволюционирует под влиянием нелинейных взаимодействий, в которых более крупные вихри переносят энергию к более мелким посредством прямого турбулентного каскада энергии. МГД-турбулентность диссипирует из-за конечного значения числа Рейнольдса и затухания мелкомасштабного движения. Временная эволюция турбулентного звукового числа Маха  $\tilde{M}_s$  показана на рис. 25. Видно, что локальное мелкомасштабное число Маха затухает от сверхзвукового значения ( $\tilde{M}_s > 1$ ) до дозвукового режима ( $\tilde{M}_s < 1$ ). Этот факт указывает на то, что турбулентный каскад, связанный с нелинейными взаимодействиями в комбинации с диссипативными эффектами на мелких масштабах, приводит к тому, что сверхзвуковые плазменные флуктуации затухают достаточно сильно к дозвуковым флуктуациям в электропроводящем течении, и турбулентность становится умеренно сжимаемой. На рис. 26 показана временная эволюция дивергенции скорости  $\text{div } u = \partial u_1 / \partial x_1 + \partial u_2 / \partial x_2 + \partial u_3 / \partial x_3$ . Для несжимаемой среды выполняется условие  $\text{div } u = 0$  из уравнения неразрывности. На рис. 26 видно, что дивергенция скорости затухает достаточно быстро и стремится к нулю (но не нуль), т. е. существенно сжимаемое турбулентное течение становится слабосжимаемым.



**Рис. 25.** Затухание турбулентного мелкомасштабного числа Маха  $\tilde{M}_s$  со временем. Наблюдается переход из сверхзвукового режима  $\tilde{M}_s > 1$  к дозвуковому  $\tilde{M}_s < 1$



**Рис. 26.** Временная динамика дивергенции скорости  $\text{div } u$ . Дивергенция скорости, характеризующая сжимаемость среды, затухает и течение со временем становится слабосжимаемым

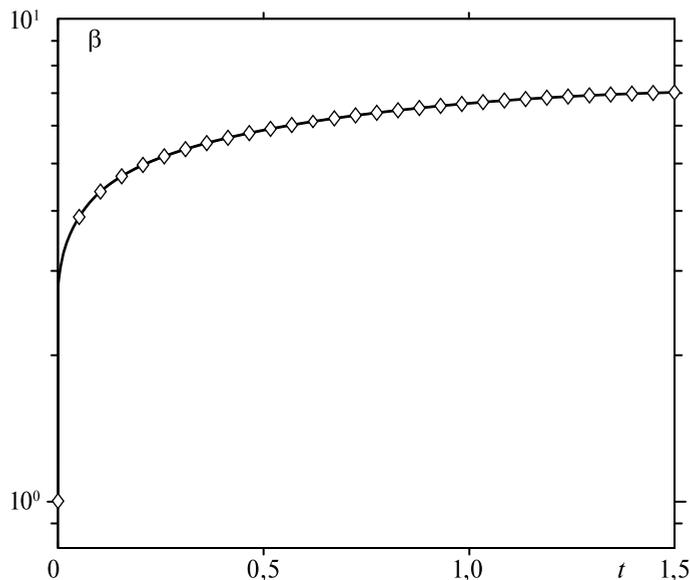
Это соответствует выводам и результатам, полученным из данных рис. 25 для локального мелкомасштабного турбулентного числа Маха  $\tilde{M}_s$ . Таким образом, в локальной межзвездной среде сжимаемое магнитогиродинамическое течение со сверхзвуковым значением числа Маха становится дозвуковым движением электропроводящей жидкости с незначительным вкладом соленоидальной компоненты скорости, т. е.  $\text{div } u \ll 1$ .

Полученные данные соответствуют результатам асимптотического анализа и оценкам, выполненным в работе (Shaikh, Zank, 2007), в которой показано, что существенно сжимаемая МГД-плазма стремится эволюционировать к умеренно сжимаемому течению с уменьшением дивергенции скорости в затухающей турбулентности, т. е.  $\text{div } u \rightarrow 0$  (или  $|ik \cdot u_k| \ll 1$  в фурье-пространстве).

Однако в работе (Shaikh, Zank, 2007) не было показано, что результирующий спектр флуктуаций плотности среды воспроизводит спектр кинетической энергии. Это будет проиллюстрировано ниже.

### 2.2.2. Динамика намагниченности плазмы

Переход МГД-плазмы от существенно сжимаемого турбулентного течения к умеренно сжимаемому течению в межзвездной среде не только преобразовывает сверхзвуковое движение в дозвуковое, но также приводит к ослаблению намагниченности плазмы. Это можно увидеть из временной эволюции турбулентной плазменной беты  $\tilde{\beta}$ , как показано на рис. 27. Как было отмечено ранее,



**Рис. 27.** Временная эволюция турбулентной плазменной беты  $\tilde{\beta}$  в сжимаемой МГД-турбулентности. Плазма из сильно намагниченной в начальный промежуток времени становится менее намагниченной со временем

плазменная бета определяется как отношение плазменного давления к давлению магнитного поля. Рисунок 27 демонстрирует, что в начальный промежуток времени плазменное давление не превышает магнитное (т. е.  $\tilde{\beta} \leq 1$ ) в сильно сжимаемой магнитогидродинамической плазме. Затем, когда существенно сжимаемые плазменные флуктуации затухают (как хорошо видно на рис. 25 и 26), намагниченность плазмы падает и плазменная бета с низкого значения ( $\tilde{\beta} \leq 1$ ) увеличивается до состояния с высоким значением ( $\tilde{\beta} > 1$ ). Из этого следует, что плазменное давление превышает магнитную энергию. В инерционном интервале турбулентности можно записать соотношение:

$$kd \geq 1 > k_0 \lambda_{mfp}, \quad (70)$$

где  $d$  — ионный гирорадиус;  $k_0 \sim 1/L_0$ ,  $L_0$  — интегральный масштаб;  $\lambda_{mfp}$  — средняя длина свободного пробега. Физически неравенства (70) означают, что частицы плазмы, связанные с магнитными силовыми линиями, выталкиваются из их гироорбит вследствие того, что увеличивается доминирующая роль плазменного давления по сравнению с магнитной энергией. Это приводит в конечном счете к ослаблению намагниченности плазмы, следовательно, и плазменных флуктуаций, и к переходу в режим с  $\tilde{\beta} > 1$  и дозвуковому слабосжимаемому течению. Преобразование мод — еще один фактор, который частично объясняет переход МГД-плазмы от сильно сжимаемого до слабосжимаемого состояния. Турбулентная плазменная бета  $\tilde{\beta}$  может быть записана как

$$\tilde{\beta} \approx \frac{8\pi\tilde{p}}{\tilde{B}^2} \sim \frac{\tilde{c}_s^2}{\tilde{u}_a^2} \sim \frac{\tilde{M}_a^2}{\tilde{M}_s^2}. \quad (71)$$

Поскольку МГД-плазма эволюционирует в режим с  $\tilde{\beta} > 1$ , следует, что альфвеновское турбулентное мелкомасштабное число Маха  $\tilde{M}_a$  уменьшается. Монотонное уменьшение  $\tilde{M}_s$  (в соответствии с рис. 25) соответствует более высокому значению  $\tilde{\beta}$ , т. е. МГД-течение становится все более и более слабосжимаемым. Также из временной динамики сжимаемого магнитогидродинамического течения следует, что магнитозвуковые флуктуации ослабевают быстрее, чем альфвеновские (альфвеновские моды, тем не менее, тоже затухают вследствие диссипации). Этот вывод совпадает с полученным теоретическим обоснованием (*Zank, Matthaeus, 1993; Shaikh, Zank, 2007*).

Постепенное увеличение турбулентной плазменной беты  $\tilde{\beta}$ , кроме того, приводит к изменению скорости турбулентного каскада в дозвуковом режиме сжимаемой МГД-плазмы. Состояние турбулентного течения с высоким значением плазменной беты  $\tilde{\beta}$  подразумевает, что сдвиговые альфвеновские моды распространяются более медленно, чем звуковые волны. Таким образом, магнитогидродинамические возмущения в установившемся состоянии упорядочены по скоростям следующим образом:

$$\tilde{u} < \tilde{u}_a < \tilde{c}_s. \quad (72)$$

Временные масштабы нелинейных взаимодействий для этих неравенств записываются в следующем виде:

$$\tau_s < \tau_a < \tau_{NL}, \quad (73)$$

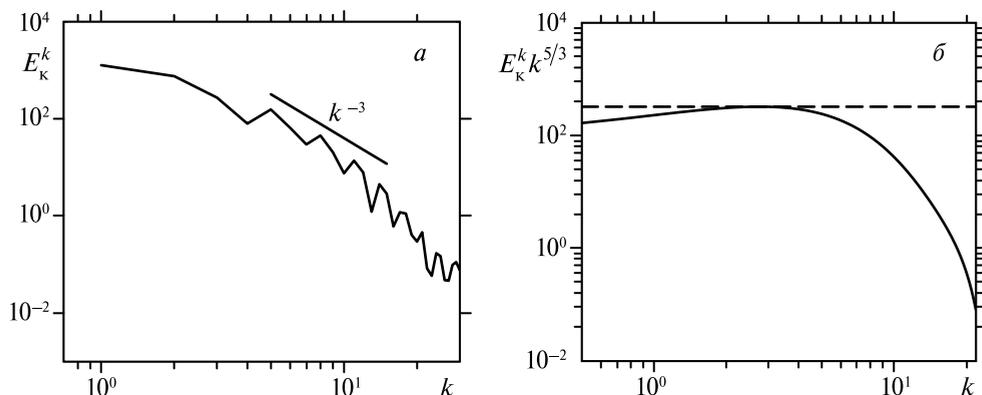
где  $\tau_s$ ,  $\tau_a$  и  $\tau_{NL}$  обозначают соответственно магнитозвуковой временной масштаб, альфвеновский масштаб времени и масштаб времени, за который вихрь совершает один оборот. Данные неравенства (73) указывают на то, что нелинейное время взаимодействий для альфвеновских мод увеличивается по сравнению с магнитозвуковыми модами. Следовательно, плазменное движение становится слабосжимаемым на альфвеновском временном масштабе. В процессе постепенного перехода к режиму слабой сжимаемости сжимаемые быстрые/медленные магнитозвуковые моды слабо связаны с альфвеновскими модами (*Shaikh, Zank, 2007*). Поэтому в каскаде постепенно начинают доминировать сдвиговые альфвеновские моды (которые в основном являются несжимаемыми), в то время как сжимаемые быстрые/медленные магнитозвуковые волны подавляют нелинейные каскады, диссипируя продольные флуктуации, что приводит к анизотропии МГД-турбулентности (подробно эффекты анизотропии будут рассмотрены далее). Когда замагниченность сжимаемой плазмы уменьшается и турбулентное плазменное давление со временем становится много больше, чем турбулентная магнитная энергия, возмущения являются главным образом ненамагниченными, т. е. ситуация аналогична гидродинамическому случаю. Таким образом, флуктуирующее магнитное поле становится в итоге достаточно слабым и почти не влияет на скорость диссипации турбулентной энергии.

### 2.2.3. Турбулентные спектры локальной межзвездной среды

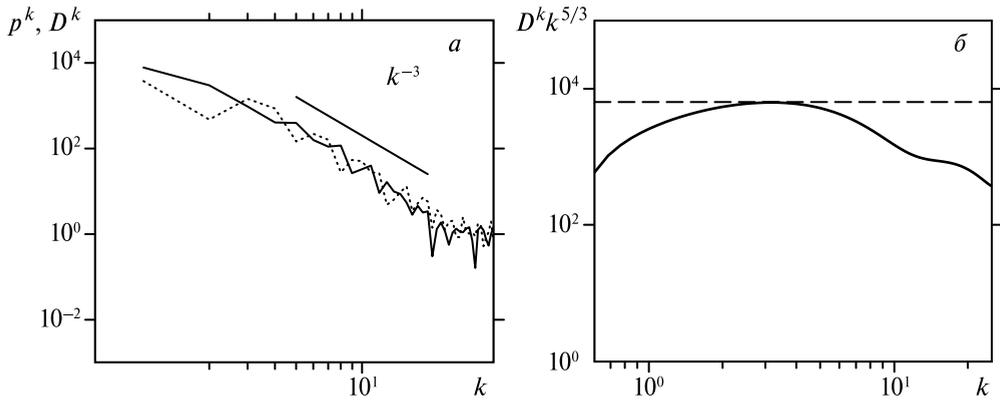
Данные наблюдений показывают, что флуктуации плотности в локальной межзвездной среде демонстрируют спектр колмогоровского типа в широком диапазоне турбулентных масштабов (*Armstrong et al., 1995; Spangler, 2001*). В межзвездной плазменной турбулентности флуктуации плотности случайны как по пространству, так и по времени. Подобные результаты были получены численно в рамках приближения «почти несжимаемой» среды (*Montgomery et al., 1987; Dastgeer, Zank, 2004*).

На рис. 28 (слева) показан спектр кинетической энергии для  $t = 1,45$ , когда турбулентное число Маха  $\tilde{M}_s < 1$ , и режим дозвуковой турбулентности, который имеет показатель степени, близкий к  $k^{-3}$  в широком диапазоне масштабов, что соответствует диссипативному интервалу турбулентности. Однако существует четко выраженный инерционный интервал турбулентности с колмогоровским спектром  $k^{-5/3}$ . Для того чтобы показать существование такого интервала и определить, при каких волновых числах он возникает, на рис. 28 (справа) изображен нормализованный (т. е. по оси у откладывается произведение  $E_k^k k^{5/3}$ , где  $E_k^k$  — кинетическая энергия в фурье-пространстве и  $k$  — волновой вектор) сглаженный спектр кинетической энергии. Видно, что при  $2 \leq k \leq 5$  существует инерционный интервал с колмогоровским спектром.

На рис. 29 (слева) приведены спектр плотности  $p^k$  и спектр флуктуаций плотности  $D^k$ . Оба графика на этом рисунке демонстрируют степенной закон распределения в фурье-пространстве, а именно  $k^{-3}$ , что соответствует спектру в диссипативном интервале колмогоровской турбулентности в режиме прямого каскада энергии для затухающей турбулентности. Нормализованный сглаженный спектр флуктуаций плотности показан на рис. 29 (справа). Заметно, что

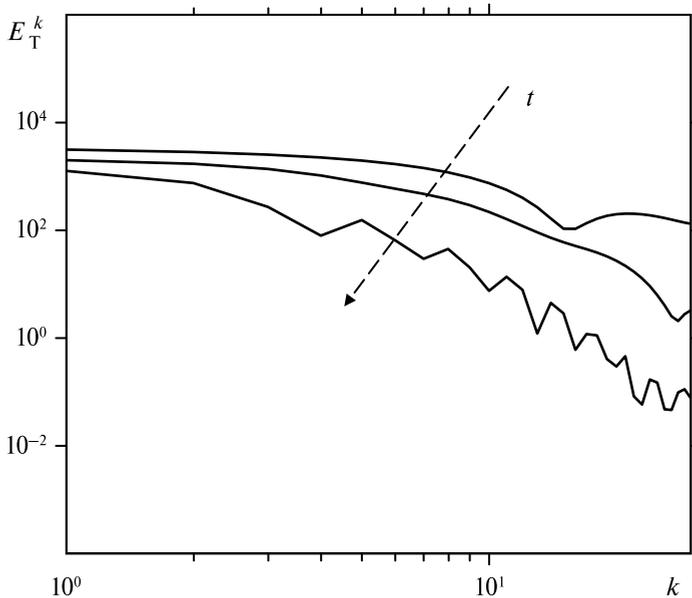


**Рис. 28.** Спектр кинетической энергии (а) и нормализованный (умноженный на  $k^{5/3}$ ) сглаженный спектр кинетической энергии (б). Видно, что степенной показатель спектра близок к  $\sim k^{-3}$  для большей части турбулентного каскада. Однако существует четко выраженный инерционный интервал колмогоровского типа  $k^{-5/3}$ , что подтверждает наблюдательные данные



**Рис. 29.** Спектр плотности — сплошная линия, спектр флуктуаций плотности — пунктирная линия (а) и нормализованный (умноженный на  $k^{5/3}$ ) сглаженный спектр флуктуаций плотности (б). На рис. а оба графика имеют показатель спектра, близкий к  $\sim k^{-3}$ . Также существует четко выраженный инерционный интервал колмогоровского типа  $k^{-5/3}$  для флуктуаций плотности, что подтверждают наблюдательные данные

так же как для спектра кинетической энергии, существует интервал с колмогоровским спектром  $k^{-5/3}$ , причем практически при таких же волновых числах  $2 \leq k \leq 5$ . В целом спектр флуктуаций плотности демонстрирует такое же поведение в фурье-пространстве, как и спектр кинетической энергии (см. рис. 28). Таким образом, можно сделать вывод, что флуктуации плотности являются



**Рис. 30.** Изменение спектра энергии со временем, где временное направление показано на рисунке штриховой линией

пассивной примесью в умеренно сжимаемом течении дозвуковой турбулентности. Теоретические модели турбулентности, кроме того, предполагают, что любая физическая характеристика течения, которая пассивно распространяется в поле фоновой турбулентности, демонстрирует схожий спектр (*Lesieur, 1990*).

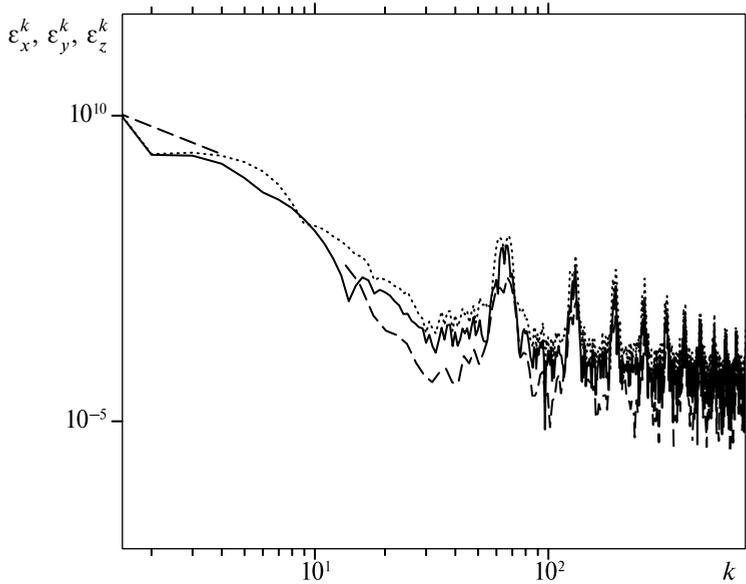
Изменение спектра полной энергии  $E_T^k$  (сумма магнитной и кинетической энергии) со временем показано на рис. 30. Видно, что со временем уменьшаются энергосодержащие крупные масштабы турбулентности. Амплитуда спектра также ослабевает, что соответствует диссипации рассматриваемого сжимаемого течения. Заметно, что увеличивается диссипативный интервал в энергетическом каскаде и уменьшается инерционный интервал, что соответствует уменьшению со временем гидродинамического числа Рейнольдса в затухающей турбулентности (инерционный интервал турбулентности прямо пропорционален числу Рейнольдса).

#### 2.2.4. Анизотропная турбулентность

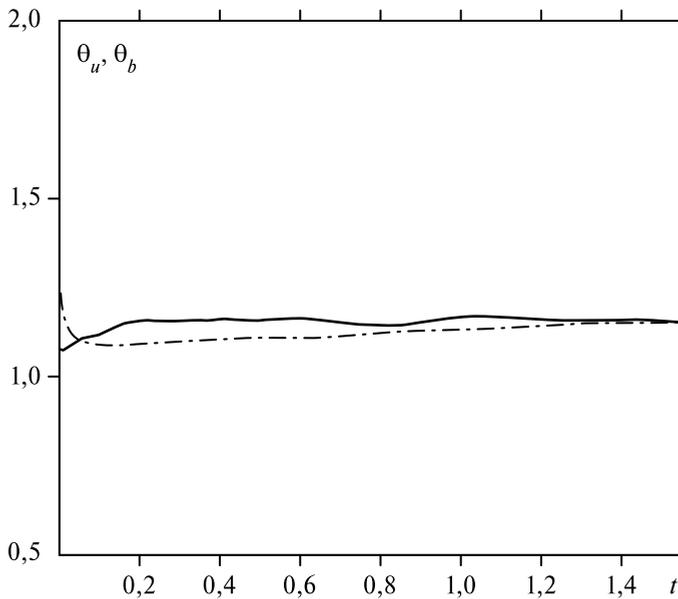
Колмогоровская модель турбулентности предполагает независимость между крупными и малыми масштабами и приводит к изотропии мелкомасштабного течения (*Колмогоров, 1941*). Колмогоров предположил, что при прохождении энергии от крупных масштабов до мелких ею будет теряться информация о механизме ее генерации. Если число шагов в энергетическом каскаде велико, можно предположить, что будет утеряна вся информация. Наименьшие масштабы «могут знать» только о том, как много энергии ими приобретается и, как можно ожидать, они будут изотропными, потерявшими всю информацию об анизотропии энергосодержащих масштабов. Турбулентность в межзвездной среде является анизотропной, что было показано как теоретически, так и по данным наблюдений (*Dastgeer, Zank, 2005; Armstrong et al., 1995*). Рисунок 31 демонстрирует, что крупномасштабное течение в сжимаемой МГД-турбулентности является анизотропным по сравнению с мелкомасштабным. Численное моделирование показывает различное поведение компонент скорости в спектральном каскаде при малых волновых числах  $k$  для  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -компонент поля скорости и почти отсутствие различий при больших фурье-модах, что означает возникновение турбулентных анизотропных каскадов главным образом на больших масштабах. На рис. 31 видно, что при больших значениях  $k$  (а именно  $k \geq 70$ ) спектр — изотропный. Таким образом, в локальной межзвездной среде крупномасштабная развитая турбулентность является анизотропной, что подтверждает результаты работ (*Dastgeer, Zank, 2004, 2005*).

Для оценки степени изотропии и симметрии течения используем угол Шебалина (*Shebalin et al., 1983*) (или другое название анизотропный угол), который определяется как

$$\operatorname{tg}^2 \theta_u = 2 \frac{G_{xx}^u + G_{xy}^u + G_{xz}^u}{G_{yx}^u + G_{yy}^u + G_{yz}^u}, \quad (74)$$



**Рис. 31.** Спектр скорости  $\varepsilon_x^k$ ,  $\varepsilon_y^k$ ,  $\varepsilon_z^k$  для  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -компонент в сжимаемой турбулентности. Сплошная линия —  $x$ -компонента; пунктирная линия —  $y$ -компонента; штриховая линия —  $z$ -компонента. Анизотропия наблюдается при низких значениях волнового числа  $k$  (т. е. на крупных масштабах), а изотропия — при больших  $k$  (на малых масштабах)



**Рис. 32.** Временная эволюция анизотропного угла для скорости  $\theta_u$  (сплошная линия) и для магнитного поля  $\theta_b$  (штрихпунктирная линия)

$$\operatorname{tg}^2 \theta_b = 2 \frac{G_{xx}^b + G_{xy}^b + G_{xz}^b}{G_{yx}^b + G_{yy}^b + G_{yz}^b}, \quad (75)$$

где  $G_{ij}^u = \langle \partial u_j / \partial x_i \rangle$  и  $G_{ij}^b = \langle \partial B_j / \partial x_i \rangle$ . Для изотропной турбулентности  $\theta = \operatorname{arctg} \sqrt{2} \approx 54^\circ \approx 1$  рад. На рис. 32 показаны изменения со временем  $t$  анизотропного угла  $\theta_u$  (для скорости) и  $\theta_b$  (для магнитного поля), характеризующие крупномасштабные структуры. После начального временного интервала анизотропия и скорости, и магнитного поля почти не меняется и выходит на некоторый уровень насыщения.

При низких значениях плазменной беты  $\beta$ , когда роль магнитной энергии существенна, анизотропия и нарушения симметрии вызваны в первую очередь магнитным полем. При больших значениях  $\beta$ , когда роль магнитного поля невелика, каскады анизотропной турбулентности наблюдаются из-за распространения сжимаемых акустических мод, которые препятствуют спектральному переносу в локальном фурье-пространстве. Эти моды в МГД-турбулентности могут быть возбуждены либо крупными масштабами, либо внешней скоростью фоновой турбулентности (*Dastgeer, Zank, 2005*).

### Выводы

В этом разделе исследовалась сжимаемая МГД-турбулентность в локальной межзвездной среде методом LES для решения системы магнитогидродинамических уравнений. Несмотря на то, что для локальной межзвездной среды характерны сверхзвуковые течения с высокими крупномасштабными числами Маха, существуют также дозвуковые флуктуации слабосжимаемых компонент межзвездной среды. Именно эти слабосжимаемые дозвуковые флуктуации отвечают за появления спектра колмогоровского типа в локальной межзвездной турбулентности, который наблюдается из экспериментальных данных. В этой главе показано, что флуктуации плотности являются пассивным скаляром в поле скорости в умеренно сжимаемой магнитогидродинамической турбулентности и демонстрируют колмогоровский спектр в диссипативном интервале энергетического каскада. Показатели степенного спектра для плотности и кинетической энергии почти совпадают и близки к  $k^{-3}$  для сжимаемой затухающей МГД-турбулентности. Также продемонстрировано изменение со временем спектра кинетической энергии, показывающей уменьшение энергосодержащих крупных вихрей и инерционного интервала и увеличение диссипативного масштаба. Показано, что турбулентное число Маха уменьшается значительно со сверхзвукового режима турбулентности ( $\tilde{M}_s > 1$ ), где рассматриваемая среда сильно сжимаема, до дозвукового значения ( $\tilde{M}_s > 1$ ), характеризующего слабосжимаемое течение. Этот вывод об уменьшении роли сжимаемости в турбулентных флуктуациях подтверждается временной эволюцией дивергенции скорости, которая уменьшается и стремится к нулю (но не нуль). В локальной

межзвездной среде переход плазмы от существенно сжимаемого МГД-турбулентного течения к умеренно сжимаемому течению не только преобразовывает сверхзвуковое движение в дозвуковое, но и приводит к ослаблению намагниченности плазмы, что было показано в данном разделе, так как плазменная бета  $\beta$  увеличивается со временем, таким образом роль магнитной энергии падает по сравнению с давлением плазмы. Также рассматривалась анизотропия турбулентного течения и было показано, что крупномасштабное течение проявляет анизотропные свойства, в то время как мелкомасштабные структуры являются изотропными.

Метод LES для изучения сжимаемой МГД-турбулентности позволил получить существенные результаты при исследовании локальной межзвездной среды, а именно были интерпретированы данные наблюдений и получены новые результаты относительно спектров турбулентности локального межзвездного газа.

### Заключение

Представим основные результаты и выводы работы.

- Сформулирован метод крупных вихрей для сжимаемой МГД-турбулентности политропной космической плазмы, показано, что в этом случае подсеточные модели получаются комбинацией и обобщением известных подсеточных слагаемых в гидродинамике сжимаемой нейтральной жидкости и несжимаемой магнитной жидкости. Исследованы предложенные подсеточные параметризации и выявлены подсеточные модели, которые демонстрируют наиболее точные результаты при моделировании затухающей сжимаемой магнитогиродинамической турбулентности при различных числах подобия. Показано, что расширенная модель Смагоринского для сжимаемого МГД-случая и модель, основанная на взаимной спиральности магнитного поля и скорости, обеспечивают наиболее точные численные результаты.
- Исследована динамика флуктуаций плотности в космической плазме методом крупных вихрей. Установлено, что исходно сильно сжимаемые флуктуации становятся слабосжимаемыми и спектр флуктуаций плотности воспроизводит спектр кинетической энергии, это соответствует тому, что флуктуации плотности переносятся магнитогиродинамическим течением в режиме пассивной примеси. Это позволило подтвердить гипотезу о слабосжимаемой природе флуктуаций плотности, наблюдаемых в локальной межзвездной среде. Исследованы свойства спектров полной энергии со временем. Установлено, что со временем уменьшаются энергосодержащие крупные масштабы турбулентности, амплитуда спектров также ослабевает. Показано, что увеличивается диссипативный интервал в энергетическом каскаде и уменьшается инерционный интервал. Исследованы свойства анизотропии МГД-турбулентности космической плазмы в условиях локального межзвездного газа. Показано, что крупномасштабное МГД-течение является анизотропным, а мелкомасштабное — изотропным в турбулентности локальной межзвездной среды.

## Литература

- Колмогоров А. Н.* Локальная структура турбулентности в несжимаемой вязкой жидкости при очень больших числах Рейнольдса // Докл. АН СССР. 1941. Т. 30 (4).
- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика: Электродинамика сплошных сред. Т. 8. М.: Физматлит, 2005.
- Обухов А. М.* О распределении энергии в спектре турбулентного потока // Докл. АН СССР. 1941. Т. 32 (1).
- Хинце И.* Турбулентность. М.: Физматлит, 1963.
- Anderson J. D.* Computational fluid dynamics: the basics with applications. McGraw-Hill, Inc., United States, 1995.
- Armstrong J. W., Rickett B. J., Spangler S. R.* Electron density power spectrum in the local interstellar medium // Astrophysical J. 1995. V. 443. Nr. 1.
- Balsara D.* Total Variation Diminishing Scheme for Relativistic Magnetohydrodynamics // Astrophysical J. Supplement. 2001. V. 132. P. 83–101.
- Bardiná J., Ferziger J. H., Reynolds W. C.* Improved subgrid scale models for large eddy simulation // AIAA 13th Fluid and Plasma Dynamics Conf. Snowmass, Colo. July 14–16, 1980. P. 10.
- Biskamp D.* Magnetohydrodynamic turbulence. United Kingdom, Cambridge University Press, 2003.
- Brandenburg A.* Computational aspects of astrophysical MHD and turbulence // Advances in nonlinear dynamos. Fluid Mechanics of Astrophysics and Geophysics / Eds. A. Ferriz-Mas, M. Nunez. L.; N. Y.: Taylor and Francis, 2003. V. 9. P. 269–344.
- Brandenburg A., Dobler W.* Hydromagnetic turbulence in computer simulations // Comp. Phys. Comm. 2002. Nr. 147. P. 471–475.
- Chernyshov A. A., Karelsky K. V., Petrosyan A. S.* Assessment of subgrid-scale models for decaying compressible MHD-turbulence // Flow, Turbulence and Combustion. 2008a. V. 80. Nr. 1. P. 21–35.
- Chernyshov A. A., Karelsky K. V., Petrosyan A. S.* Development of large eddy simulation for modeling of decaying compressible MHD-turbulence // Physics of Fluids. 2007a. V. 19. Nr. 5. P. 055106.
- Chernyshov A. A., Karelsky K. V., Petrosyan A. S.* Large eddy simulation of compressible magnetohydrodynamic turbulence in heat-conducting plasma // J. M. L. M. Advances in Turbulence XI: Proc. of the EUROMECH European Turbulence Conference / Eds. Palma, A. Silva Lopes. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007b. P. 20–22.
- Chernyshov A. A., Karelsky K. V., Petrosyan A. S.* Large-eddy simulation of magnetohydrodynamic turbulence in compressible fluid // Phys. Plasmas. 2006a. V. 13. Nr. 3. P. 032304.
- Chernyshov A. A., Karelsky K. V., Petrosyan A. S.* Modeling of compressible magnetohydrodynamic turbulence in electrically and heat conducting fluid using large eddy simulation // Physics of Fluids. 2008b. V. 20. Nr. 8. P. 085106.

- Chernyshov A.A., Karelsky K.V., Petrosyan A.S.* Subgrid-scale modelling in large-eddy simulations of compressible magnetohydrodynamic turbulence // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling.* 2006b. V. 21. Nr. 1. P. 1–20.
- Chernyshov A.A., Karelsky K.V., Petrosyan A.S.* Subgrid-scale modelling of compressible magnetohydrodynamic turbulence in heat-conducting plasma // *Phys. Plasmas.* 2006c. V. 13. Nr. 10. P. 104501.
- Chernyshov A.A., Karelsky K.V., Petrosyan A.S.* Three-dimensional modeling of compressible magnetohydrodynamic turbulence in the local interstellar medium // *Astrophysical J.* 2008c. V. 686. P. 1137–1144.
- Dahlburg R.B., Picone J.M.* Evolution of the Orszag-Tang Vortex System in a Compressible Medium. I. Initial Average Subsonic Flow // *Phys. Fluids B.* 1989. V. 1. P. 2153.
- Dastgeer S., Zank G.P.* Density spectrum in the diffuse interstellar medium and solar wind // *Astrophysical J.* 2004. V. 602. Nr. 2. P. L29–L32.
- Dastgeer S., Zank G.P.* Turbulence in nearly incompressible fluids: density spectrum, flows, correlations and implication to the interstellar medium // *Nonlin. Processes Geophys.* 2005. V. 12. P. 139–148.
- Elmegreen B.G., Scalo J.* Interstellar turbulence I: Observations and processes // *Annu. Rev. of Astronomy and Astrophysics.* 2004. V. 42. P. 211.
- Erlebacher G., Hussaini M., Speziale C., Zang T.* Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows // *J. Fluid Mechanics.* 1992. V. 238. P. 155–185.
- Ferziger J.* Large eddy simulation // *Simulation and Modeling of Turbulent Flows* // Eds. T. Gatski, Y. Hussami, J. Lumley. N. Y.: Oxford University Press, 1996. P. 109–154.
- Germano M., Piomelli U., Moin P., Cabot W.* A dynamic subgrid-scale eddy-viscosity model // *Phys. Fluids. A.* 1991. V. 3. Nr. 7. P. 1760–1765.
- Gilman P.A., Glatzmaier G.A.* Compressible convection in a rotating spherical shell. I. Anelastic equations // *Astrophys. J. Supplement Series.* 1981. V. 45. P. 335–388.
- Goldstein M., Roberts D., Matthaeus W.* Magnetohydrodynamics turbulence in the solar wind // *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 1995. V. 33. P. 283–325.
- Haugen N.E.L., Brandenburg A.* Inertial range scaling in numerical turbulence with hyperviscosity // *Phys. Rev. E.* 2004. V. 70(026405). P. 1–7.
- Knaepen B., Kassinos S., Carati D.* Magnetohydrodynamic turbulence at moderate magnetic Reynolds number // *J. Fluid Mechanics.* 2004. V. 513. P. 199–220.
- Knaepen B., Moin P.* Large-eddy simulation of conductive flows at low magnetic Reynolds number // *Center for Turbulence Research Annu. Research Briefs.* 2003. P. 297–306.
- Ladeinde F., Gaitonde D.* Magnetic Reynolds number effects in compressible magnetohydrodynamic turbulence // *Phys. Fluids.* 2004. V. 16. Nr. 6. P. 2097–2121.
- Lantz S.R., Fan Y.* Anelastic Magnetohydrodynamic Equations for Modeling Solar and Stellar Convection Zones // *Astrophysical J. Supplement Series.* 1999. V. 121. Nr. 1. P. 247–264.
- Leonard A.* Energy cascade in large eddy simulations of turbulent fluid flows // *Adv. Geophys.* 1974. V. 18. P. 237–248.

- Lesieur M.* Turbulence in Fluids. Kluwer Academic Publisher. Dordrecht, Holland, 1990.
- Lilly D.* A proposed modification of the germano subgrid scale closure method // Phys. Fluids A. 1992. V. 4. P. 633–635.
- Liu S., Meneveau C., Katz J.* On the properties of similarity subgrid-scale models as deduced from measurements in a turbulent jet // J. Fluid Mechanics. 1994. V. 275. P. 83–119.
- McLow M.-M.* Turbulence in the interstellar medium // Astrophys. Space Sci. 2004. V. 289. P. 323–331.
- McLow M.-M., Klessen R. S., Burkert A., Smith M. D.* Kinetic energy decay rates of supersonic and super-alfvenic turbulence in star-forming clouds // Physical Rev. Letters. 1998. V. 80. P. 2754–2764.
- Martin P., Piomelli U., Candler G.* Subgrid-scale models for compressible large-eddy simulations // Theoret. Computational Fluid Dynamics. 2000. V. 13. P. 361–376.
- Mininni P. D., Pouquet A., Montgomery D. C.* Small scale structures in three-dimensional magnetohydrodynamic turbulence // Physical Rev. Letters. 2006. V. 97. P. 244503.
- Montgomery D., Brown M. R., Matthaeus W. H.* Density fluctuation spectra in magnetohydrodynamic turbulence // J. Geophys. Res. 1987. V. 92. P. 282–284.
- Müller W.-C., Biskamp D.* Scaling properties of three-dimensional magnetohydrodynamic turbulence // Physical Rev. Letters. 2000. V. 84. P. 475–478.
- Müller W.-C., Carati D.* Dynamic gradient-diffusion subgrid models for incompressible magnetohydrodynamics turbulence // Phys. Plasmas. 2002. V. 9. Nr. 3. P. 824–834.
- Müller W.-C., Grappin R.* Spectral energy dynamics in magnetohydrodynamic turbulence // Physical Rev. Letters. 2005. V. 95. Nr. 114502.
- Orszag S., Tang C.-M.* Small-scale structure of two-dimensional magnetohydrodynamics // J. Fluid Mechanics. 1979. V. 90. Nr. 129–143.
- Park N., Yoo J. Y., Choi H.* Discretization errors in large eddy simulation: on the suitability of centered and upwind-biased compact difference schemes // J. Computational Physics. 2004. V. 198. P. 580–616.
- Picone J. M., Dahlburg R. B.* Evolution of the orszag-tang vortex system in a compressible medium. II. Supersonic flow // Phys. Fluids B. 1991. V. 3. P. 29–44.
- Porter D. H., Pouquet A., Woodward P. R.* A numerical study of supersonic turbulence // Theor. and Computational Fluid Dynam. 1992. V. 4. P. 13–49.
- Reynolds O.* On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 1895. V. 186. P. 123–164.
- Sagaut P., Grohens R.* Discrete filters for large eddy simulation // Intern. J. Numer. Mech. Fluids. 1999. V. 31. P. 1195–1220.
- Shaikh D., Zank G. P.* Three-dimensional simulations of turbulent spectra in the local interstellar medium // Nonlin. Processes Geophys. 2007. V. 4. P. 351–359.
- Shebalin J. V., Matthaeus W. H., Montgomery D.* Anisotropy in MHD turbulence due to a mean magnetic field // J. Plasma Phys. 1983. V. 29. P. 525–547.

- Smagorinsky J.* General circulation experiments with the primitive equations // *Mon. Weather Rev.* 1963. V. 91. P. 99–164.
- Spangler S.* Multi-scale plasma turbulence in the diffuse interstellar medium // *Space Science Rev.* 2001. V. 99. P. 261–270.
- Speziale G., Erlebacher G., Zang T., Hussaini M.* The subgrid-scale modelling of compressible turbulence // *Phys. Fluids.* 1988. V. 31. Nr. 4. P. 940–942.
- Theobald M., Fox P., Sofia S.* A subgrid-scale resistivity for magnetohydrodynamics // *Phys. Plasmas.* 1994. V. 1. Nr. 9. P. 3016–3032.
- Ustyugov S.D., Andrianov A.N.* Numerical simulation of magnetoconvection in a stellar envelope // *Center for Turbulence Research. Annu. Research Briefs.* 2002. P. 281–288.
- Vreman B.* Direct and Large-Eddy Simulation of the Compressible Turbulent Mixing Layer. PhD thesis. University of Twente, Netherlands, 1995.
- Williamson J.H.* Low-storage runge-kutta schemes // *J. Computational Physics.* 1980. V. 35. P. 48–56.
- Zang Y., Street R.L., Koseff J.R.* A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows // *Phys. Fluids A.* 1993. V. 5. Nr. 12. P. 3186–3196.
- Zank G.P., Matthaeus W.H.* Nearly incompressible fluids. II. Magnetohydrodynamics, turbulence and waves // *Phys. Fluids A.* 1993. V. 5. Nr. 1. P. 257–273.
- Zank G.P., Matthaeus W.H.* The equations of nearly incompressible fluids. I. Hydrodynamics, turbulence and waves // *Phys. Fluids A.* 1991. V. 3. Nr. 1. P. 69–82.
- Zhou Y., Vahala G.* Aspects of subgrid modelling and large-eddy simulation of magnetohydrodynamic turbulence // *J. Plasma Physics.* 1991. V. 45. P. 239–249.

## LARGE EDDY SIMULATION FOR STUDY OF SPACE AND ASTROPHYSICAL PLASMA

A. A. Chernyshov, K. V. Karelsky, A. S. Petrosyan

*Space Research Institute of the Russian Academy of Science*

In the present work large eddy simulation (LES) technique for study of compressible magnetohydrodynamic (MHD) turbulence is developed. The filtered equations of magnetohydrodynamics of compressible fluid are obtained with the use of mass-weighted filtering procedure (Favre filtering). Favre-filtered equations for large-scale component of turbulence include subgrid-scale (SGS) terms describing subgrid phenomena. Five SGS models for closure of subgrid terms are suggested: the Smagorinsky model, the Kolmogorov model, the cross-helicity model, the scale-similarity model and mixed model for MHD case. For the performance evaluation of various subgrid-scale closures in the LES approach, the obtained results of numerical computations for large eddy simulation are compared with the results of direct numerical simulation of three-dimensional compressible magnetohydrodynamic tur-

bulence under various similarity parameters, namely, magnetic Reynolds numbers, hydrodynamic Reynolds numbers and Mach numbers. The comparison between large eddy simulation and direct numerical simulation is carried out regarding the time evolution of kinetic and magnetic energy, cross helicity, subgrid-scale and molecular dissipations for kinetic and magnetic energy, turbulent intensities and quantities that describe anisotropy of flow, that is, skewness and kurtosis of velocity and magnetic field and the energy spectra. It is shown that some subgrid-scale models proposed in the work provide sufficient dissipation of kinetic and magnetic energy, reduce computational efforts and produce adequate results of magnetohydrodynamic turbulent modeling for various values of similarity parameters of flows. Also, establishment of weakly compressible limit with Kolmogorov-like density fluctuations spectrum using advantages of LES method is studied. Notwithstanding the fact that supersonic flows with high value of large-scale Mach numbers are characterized in interstellar medium, nevertheless, there are subsonic fluctuations of weakly compressible components of interstellar medium. It is shown that density fluctuations are a passive scalar in a velocity field in weakly compressible MHD turbulence. We use our computations results to study spectra of kinetic energy and density fluctuations, dynamics of the turbulent plasma beta and anisotropic properties of the magnetoplasma fluctuations in the local interstellar medium.

## **ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ОБТЕКАНИЯ СЛОЖНОЙ ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ АТМОСФЕРНЫМ ТЕЧЕНИЕМ, НАГРУЖЕННЫМ ТВЕРДОЙ ПРИМЕСЬЮ**

**А. С. Петросян, К. В. Карельский, И. В. Смирнов**

*Институт космических исследований Российской академии наук*

*E-mail: kkkarelsk@iki.rssi.ru; apetrosy@iki.rssi.ru*

В работе создана и реализована новая физическая модель переноса атмосферных примесей течением ветра в областях с неровными и/или изменяющимися во времени границами. Система невязких уравнений атмосферы, основанная на модели Р. И. Нигматулина эффективных термодинамических характеристик для замороженной дисперсной фазы, решается методом Годунова. Структура используемой разностной схемы обеспечивает диффузию областей с высокой энтропией по всем пространственным координатам, воспроизводя качественно эффекты молекулярной вязкости. Влияние схемной вязкости проявляется наиболее весомо, когда пограничный слой нагружен твердыми частицами в областях значительного изменения рельефа поверхности.

### **Введение**

Математическое моделирование является основным инструментом для исследования динамики аэрозолей в атмосфере (Алоян, 2008). В настоящей работе предложена и реализована физическая модель обтекания сложной подстилающей поверхности атмосферным течением, нагруженным твердой примесью. Эта модель описывает перенос атмосферных примесей течением ветра в областях с неровными и/или изменяющимися во времени границами. Важное практическое значение имеют задачи определения динамики пылевых облаков в атмосфере и их взаимодействие со сложной подстилающей поверхностью. В частности, одним из актуальных вопросов является изучение структуры и динамики аэрозольных течений в областях с препятствиями типа отдельных зданий, их групп, уличных каньонов. Прогноз динамики пиковых концентраций в таких областях необходим при планировании развития городских территорий. Другой важной практической задачей является изучение динамики аэрозольных течений в природных ландшафтах, содержащих существенные особенности, такие как, например, горные цепи, каньоны и т. п. Понимание механики эоловых структур и эрозии почв в таких регионах требует знания особенностей нагруженных атмосферных течений в этих областях. Заметим, что в обеих постановках задачи характерный размер вертикальной неоднородности сравним с его горизонтальным размером, поэтому моделирование таких течений формулируется как задача обтекания препятствия той или иной формы. Очевидно, что характерные времена указанных процессов существенно меньше характерного времени изменчивости атмосферного пограничного слоя (Зилитинкевич,

1970; *Lebedev et al.*, 2000). Наличие твердой примеси в атмосферном потоке в корне меняет радиационный баланс в силу изменения прозрачности воздушных масс, что в свою очередь обуславливает изменение всей гидродинамики атмосферных потоков и ведет к созданию новых течений. Особую роль в динамике атмосферных потоков играет орография. Наличие изменений в геометрии подстилающей поверхности может принципиально изменить картину течения. Компактно распространяющаяся дисперсная фаза, занимающая односвязную область, может перейти в многосвязный режим либо сильно изменить размеры и геометрию области, занимаемой твердыми частицами. Немаловажны также изменения скорости распространения и декремента затухания слабых возмущений в области двухфазного течения, которое в ряде задач имеет основополагающее значение. Принципиально обсуждаемая проблема разбивается на две подзадачи: описание атмосферного потока над сложной подстилающей поверхностью в неоднородных и/или нестационарных условиях и предсказание пространственно-временного распределения концентрации примесей, переносимых потоком. Неоднородные свойства поверхности и их изменение во времени принципиально изменяют картину течения. Обтекая всевозможные препятствия (горы, кратеры, отдельные здания, уличные каньоны), течение подвергается внезапным или постепенным изменениям. Более того, зачастую разные пространственно-временные изменения поверхности происходят одновременно, что делает практически невозможным построение адекватной модели турбулентного пограничного слоя над такими областями.

Сложная топология течений в подобных комплексных областях изменяет сам характер примеси, превращая изначально пассивную примесь в активную (изменяющую характер гидродинамического течения) и наоборот (*Гришин, Фомин*, 1984). Более того, изначально однородное облако примеси трансформируется в сложную неоднородную структуру, включающую области высокой концентрации примесей, обладающих собственным динамическим поведением. В результате помимо упомянутой выше возможности изменения характера примеси мы сталкиваемся с необходимостью анализа взаимодействия таких образований с собственно облаком частиц и прогнозирования времени их жизни. Таким образом, недиффузионный перенос твердых частиц возникает и в случае применимости приближения пассивной примеси.

В данной работе рассмотрен метод описания переноса примесей течением атмосферы на сложной границе. Предлагаемый метод направлен на преодоление обсуждаемых выше трудностей традиционных методов и фактически расширяет возможности прогнозирования переноса твердых частиц в случае неприменимости приближения пассивного скаляра или частичного изменения характера примесей в облаке. Наша модель позволяет также анализировать явления, вызванные сложной топологией течения на препятствиях, и описывать процессы на границе облака твердых частиц и чистой атмосферы. В рамках нашей модели мы используем уравнения Нигматулина (*Нигматулин*, 1987), описывающие двухфазную среду «газ – примесь» уравнениями идеального газа с пересчитанными уравнениями состояния. Эффективное уравнение состо-

яния такой среды зависит от характеристического размера и концентрации сферических частиц и в пределе отсутствия твердой фазы переходит в обычные уравнения идеальной жидкости. Фактически задача анализа переноса частиц в атмосфере сводится к решению уравнений идеального газа с переменным в пространстве и времени уравнением состояния.

При этом обеспечивается возможность описания нагруженной и чистой атмосферы одинаковыми уравнениями, отличающимися лишь термодинамическими свойствами. Практически это означает применимость такой системы уравнений для моделирования границы облака твердых частиц и чистой атмосферы. Используемая система уравнений идеального газа с переменным уравнением состояния содержит непосредственную зависимость поля гидродинамической скорости от концентрации твердой фазы, что практически означает возможность выхода за пределы применимости приближения пассивной примеси там, где это возможно.

Основная идея предлагаемого метода состоит в использовании невязких уравнений для моделирования переноса твердых частиц вблизи сложной поверхности (Куликовский и др., 2001). Для движений свободной атмосферы число Рейнольдса, характеризующее соотношение силы инерции и силы вязкости в гидродинамических уравнениях, очень велико и нелинейные инерционные члены существенно превосходят по величине слагаемое, содержащее коэффициент молекулярной вязкости. Совершенно другая ситуация возникает для течений вблизи твердой поверхности, где вязкие механизмы играют принципиальную роль.

Для вязкой атмосферы со сколь угодно малым коэффициентом вязкости течения должны удовлетворять «условиям прилипания», требующим обращения в нуль полной скорости потока на твердой поверхности. Безусловно, и в этом случае должна выполняться гипотеза Прандтля: для довольно широкого диапазона условий в слоях, прилегающих к твердой границе, диссипация энергии атмосферных течений сравнима по величине с проявлением сил инерции. Поэтому, согласно гипотезе Прандтля, при движении атмосферы, характеризующемся большим числом Рейнольдса, вблизи обтекаемой подстилающей поверхности образуется пограничный слой, в пределах которого обеспечивается необходимый переход от нулевых значений скорости ветра на поверхности до значений на внешней границе слоя, весьма близких к тем, которые получились бы при течениях идеальной атмосферы. В пределах этого слоя быстрые градиенты скорости приводят к тому, что эффекты вязкости сравнимы по величине с влиянием сил инерции. Для интересующих нас условий значительные изменения гидродинамических полей вблизи твердой границы вызываются не только и не столько условием прилипания на поверхности, но и разнообразной формой ее рельефа: горы, уличные каньоны, отдельные здания. Транспортировка твердых частиц, их подъем и осаждение также приводят к значительным градиентам гидродинамических полей. Интересуясь главным образом динамическими процессами переноса твердых частиц, сопровождающими обтекание по-

верхности сложного рельефа ветровыми потоками, мы используем уравнения невязкой гидродинамики (*Седов*, 1984).

Таким образом, нам необходимо «примирить», с одной стороны, представление о больших градиентах ветра в приповерхностном слое и, с другой стороны, пренебрежение молекулярной вязкостью в уравнениях двухфазной атмосферы. Речь идет об обтекании больших градиентов поля с помощью схемной вязкости используемого численного алгоритма для моделирования явлений вблизи поверхности планеты.

Для расчетов использовался метод Годунова (*Годунов*, 1976) для численного решения уравнений двухфазной атмосферы. Суть метода Годунова заключается в использовании точных обобщенных решений задачи распада произвольного разрыва при дискретизации законов сохранения массы, импульса и энергии в каждой ячейке области моделирования на каждом временном шаге. Эти решения включают локальные тангенциальные разрывы, которые не проявляются на масштабах внешнего течения, но тем не менее обеспечивают диссипацию кинетической энергии, как это необходимо для течений в пограничном слое. Структура используемой разностной схемы обеспечивает диффузию областей с высокой энтропией по всем пространственным координатам, воспроизводя качественно эффекты молекулярной вязкости. При этом влияние схемной вязкости проявляется наиболее весомо в тех областях, где нагруженная часть атмосферного потока граничит с областями чистой атмосферы, и в областях значительного изменения рельефа поверхности. Именно в таких случаях влияние молекулярной вязкости также усиливается и в реальных атмосферных течениях. Величина схемной вязкости зависит от градиентов подсеточных течений, существенно зависит от выбранного размера сетки и имеет конечный предел при ее измельчении. Проявление схемной вязкости при обтекании областей высокой плотности внутри атмосферного течения обеспечивает качественное моделирование существенно турбулентных эффектов, характерных для сложных многофазных течений, которые при других подходах нуждаются в параметризации (*Глазунов*, 2009а, б). Предложенный в данной работе метод тесно связан с современными идеями использования конечно-объемных методов для моделирования турбулентных течений без использования подсеточного моделирования (*Hikel, Adams*, 2007; *Hikel et al.*, 2006; *Hikel et al.*, 2007; *Hikel et al.*, 2004).

Поставленные задачи предъявляют ряд требований к физической и численной модели. Прежде всего это экономичность, учет сложной геометрии и открытость по отношению к дополнительным физическим условиям, адекватное отражение основных физических процессов. Описание таких дисперсных систем в ряде случаев возможно реализовать на базе односкоростной механики дисперсных систем. Подобное представление правомерно при достаточно малых размерах частиц в газовой среде (*Billett, Toro*, 1997). Предположение одинаковой скорости частиц и газа обеспечивает возможность описания движения дисперсных систем, рассматриваемых в качестве фиктивного газа с некоторым эффективным показателем адиабаты. Эта идея была развита в работе

(Арутюнян, 1979), где показано, что для ее реализации необходимо, чтобы в процессе движения объем газа мало отличался от объема смеси.

В первом разделе данной работы записаны уравнения атмосферы со взвешенными частицами и показаны границы применимости односкоростной модели. Во втором разделе построена разностная схема для предложенной системы. В третьем разделе проведено сравнение результатов расчетов предлагаемой модели с имеющимися экспериментальными данными. В четвертом разделе показаны результаты численных экспериментов для различных типов подстилающих поверхностей. В заключении сформулированы основные выводы работы.

## 1. УРАВНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ СО ВЗВЕШЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ

В данном разделе описана система уравнений атмосферы со взвешенными частицами, основанная на модели Р. И. Нигматулина эффективных термодинамических характеристик для замороженной дисперсной фазы. Гетерогенные эффекты, обусловленные наличием дисперсной фазы, существенно осложняют исследование процессов в приповерхностном слое атмосферы, поэтому для адекватного моделирования необходим ряд дополнительных предположений (Арутюнян, 1994). Считая, что размеры частиц много меньше характерных масштабов изучаемых атмосферных течений, мы будем описывать макроскопические процессы в такой атмосфере с помощью осредненных параметров. Для этого будут использованы уравнения сохранения массы, импульса и энергии фаз запыленной атмосферы, полученные методом осреднения соответствующих уравнений однофазных сред с учетом граничных условий на межфазных поверхностях. В настоящей работе решается задача обтекания сложной подстилающей поверхности, поэтому мы интересуемся процессами на характерных временах, много меньших характерного времени изменчивости атмосферного пограничного слоя, и можем пренебречь эффектами, обусловленными наличием гравитационного поля.

Ниже полагаем выполненными следующие предположения относительно атмосферы со взвешенными частицами. Объемная концентрация твердой фазы не очень велика. Обозначим величиной  $\alpha_i$  ( $i = 1, 2$ ) долю объема смеси, занимаемую каждой фазой:  $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ , ( $\alpha_i \geq 0$ ). Это означает, что  $\alpha_2^2 \leq 1$ . Твердая фаза присутствует в виде сферических частиц одинакового радиуса  $a$ . Пусть  $\rho_1$  и  $\rho_2$  — истинные плотности веществ несущей атмосферы и взвешенных частиц,  $n$  — число частиц дисперсной фазы в единице объема смеси. Тогда согласно этому предположению имеем:  $\alpha_2 = \frac{4}{3}\pi a^3 n$ ,  $\alpha_1 = 1 - \alpha_2$ . Массы фаз в единице объема атмосферы  $\rho_i$  ( $i = 1, 2$ ), определяющие в сумме плотность смеси  $\rho$ , равны:  $\rho_1 = \rho_1^0 \alpha_1$ ,  $\rho_2 = \rho_2^0 \alpha_2$ ,  $\rho = \rho_1 + \rho_2$ . Мы пренебрегаем эффектами хаотического и внутреннего движений твердых частиц, их непосредственным

взаимодействием и столкновением, а также процессами дробления и слипания частиц. Вязкость и теплопроводность жидкой и твердой фаз не проявляются в макроскопическом переносе импульса и энергии. Их учет требуется только при описании процессов межфазного взаимодействия. Это позволит использовать на параметры жидкой фазы граничные условия непротекания вблизи твердой поверхности. Плотность несущей атмосферы много меньше плотности вещества твердых частиц.

При выполнении вышеуказанных условий атмосфера со взвешенными твердыми частицами допускает осредненное гидродинамическое описание для несущей жидкости и твердой фазы. Если скорость  $V$  и температура  $T$  обеих фаз совпадают, то такую смесь можно описывать уравнениями невязкой и нетеплопроводной среды калорически совершенного газа. В рамках трехмерной задачи эти уравнения имеют вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho v_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_x v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_x v_z)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x v_y)}{\partial x} + \frac{\partial(p + \rho v_y^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_y v_z)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x v_z)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y v_z)}{\partial y} + \frac{\partial(p + \rho v_z^2)}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial(e + p)v_x}{\partial x} + \frac{\partial(e + p)v_y}{\partial y} + \frac{\partial(e + p)v_z}{\partial z} = 0, \end{array} \right. \quad (1)$$

где  $e$  — полная энергия единицы объема смеси:  $e = \rho \left( \varepsilon + \frac{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}{2} \right)$ ;  $\varepsilon(\rho, p)$  — внутренняя энергия, определяемая уравнением состояния. В соответствии с моделью Нигматулина (Нигматулин, 1987) реология смеси может быть описана уравнением состояния совершенного газа с эффективной газовой постоянной  $R$ :  $\varepsilon = cT$ ,  $p = \rho RT$ , определяемой удельным соотношением теплоемкостей несущего газа и примеси:  $R = x_1 R_1$ ,  $c = x_1 c_1 + x_2 c_2$ ,  $x_i = \rho_i / \rho$ ,  $x_1 + x_2 = 1$ ;  $R_1$  — газовая постоянная несущей фазы;  $c$ ,  $c_1$ ,  $c_2$  — теплоемкость смеси, несущей фазы и твердой примеси при постоянном давлении соответственно. Таким образом, для замыкания системы (1) остается добавить уравнение на изменение массы примеси:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_2 v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_2 v_z)}{\partial z} = 0. \quad (2)$$

Описанная схема атмосферы с твердой примесью является особенно привлекательной для моделирования процессов вблизи твердой поверхности, поскольку она постоянно совпадает по форме с классическими гидродинамическими уравнениями совершенного газа с перенормированным показателем адиабаты  $\gamma$  (Овсянников, 1981):  $\gamma = (c + R)/c \leq \gamma_1$  и перенормированной скоростью звука:  $c_s = \sqrt{(\gamma p)/\rho} = c_{1s} \sqrt{(\gamma x_1)/\gamma_1} \leq c_{1s}$ . Совпадение по форме уравнений запыленной и свободной от пыли атмосферы обеспечивает возможность моделирования нестационарных процессов переноса частиц в атмосфере и движений пылевых облаков. В частности, это позволяет исследовать устойчивость фронта расширения пылевого облака и параметризовать нейтральный режим, описывающий границу устойчивости локальной пылевой бури.

Основное ограничение обсуждаемой модели связано с пренебрежением двухскоростными эффектами из-за относительного движения фаз, вызванного их силовым взаимодействием. Заметим, что уменьшение размера частиц при заданных параметрах атмосферы, естественно, приводит к уменьшению времени выравнивания скорости и температуры фаз. Если характерное время изучаемого течения много меньше времени межфазной релаксации скоростей, мы можем использовать односкоростную систему уравнений, предложенную Р. И. Нигматулиным (Нигматулин, 1987). Согласно этой модели (Нигматулин, 1987), для малых характерных чисел Рейнольдса ( $Re_{1,2} \leq 1$ ), описывающих обтекание частицы атмосферным потоком, время релаксации определяется вязкостью несущей фазы  $\mu_1$ , размером  $a$  и плотностью вещества частицы

$\rho_2^0$ :  $t_1 = \frac{2a^2 \rho_2^0}{9\mu}$ . В другом предельном случае — больших чисел Рейнольдса

( $Re_{1,2} \geq 50$ ) — соответствующее время выравнивания  $t$  скоростей фаз определяется плотностью несущей фазы  $\rho_1^0$ , скоростями несущей фазы  $v_0$  и частицы  $v_2$ :

$$t_2 = \frac{16a}{3} \frac{\rho_2^0}{\rho_1^0} \frac{1}{|v_0 - v_2|} \ll t_1.$$

## 2. РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ

Опишем процедуру построения разностной схемы на примере расчета двумерной нестационарной задачи обтекания сложной поверхности атмосферным течением, содержащим дисперсное облако, в прямоугольной расчетной области. В данной постановке мы считаем известными все характеристики течения внутри расчетной области в начальный момент времени и значения всех гидродинамических характеристик на границах расчетной области с атмосферой на протяжении всего времени расчета. Таким образом, имеем краевую задачу нестационарного обтекания.

Для построения разностной схемы в данной работе использована кубическая ортогональная сетка с постоянным шагом; соответственно для двумерного примера сетка берется квадратной. После наложения кубической палетки часть ячеек вблизи подстилающей поверхности окажутся частично принадлежащими атмосферному течению, частично — подстилающей поверхности. В случае если подстилающая поверхность занимает более половины объема, ячейка считается фиктивной и служит для реализации условия непротекания на твердой поверхности, в противоположном случае ячейка считается обычной внутренней ячейкой. Для реализации граничных условий с атмосферой будет использоваться ряд фиктивных ячеек, непосредственно примыкающий к расчетной области. Таким образом, будет задана сетка  $(X + 2) \times (Y + 2)$  с некоторым постоянным шагом  $L$ , полностью покрывающая расчетную область. Следует отметить, что только  $X \times Y$  ячеек являются внутренними для расчетной области, остальные  $2X + 2Y$ , будучи фиктивными, служат для реализации граничных условий. Очевидно, в трехмерной постановке сетка будет состоять из  $(X + 2) \times (Y + 2) \times (Z + 2)$  ячеек, из которых  $X \times Y \times Z$  являются внутренними для расчетной области и  $2X + 2Y + 2Z$  — фиктивными, служащими для реализации граничных условий. В данной постановке задачи имеются два типа граничных условий: условия непротекания на твердой обтекаемой поверхности и открытые условия на границе с атмосферой, таким образом, и соответствующие фиктивные ячейки будут двух разных типов.

Для задания начальных условий необходимо найти осредненные по внутренним ячейкам значения начальных гидродинамических параметров. В нашей постановке мы будем считать их сразу заданными в указанном виде.

Расчетные формулы разностной схемы могут быть получены интегрированием по пространственно-временному объему дифференциальных уравнений и представлением полученного интеграла в виде суммы интегралов по каждой внутренней ячейке расчетной области в отдельности. Тогда после перехода к поверхностным интегралам для каждой внутренней ячейки можно записать в трехмерном случае:

$$\begin{aligned}
 & \iiint \rho_1 dx dy dz + \rho_1 v_x dy dz dt + \rho_1 v_y dx dz dt + \rho_1 v_z dx dy dt = 0, \\
 & \iiint \rho_2 dx dy dz + \rho_2 v_x dy dz dt + \rho_2 v_y dx dz dt + \rho_2 v_z dx dy dt = 0, \\
 & \iiint \rho_1 v_x dx dy dz + (p + \rho_1 v_x^2) dy dz dt + \rho_1 v_x v_y dx dz dt + \rho_1 v_x v_z dx dy dt = 0, \\
 & \iiint \rho_1 v_y dx dy dz + \rho_1 v_x v_y dy dz dt + (p + \rho_1 v_y^2) dx dz dt + \rho_1 v_y v_z dx dy dt = 0, \\
 & \iiint \rho_1 v_z dx dy dz + \rho_1 v_x v_z dy dz dt + \rho_1 v_y v_z dx dz dt + (p + \rho_1 v_z^2) dx dy dt = 0, \\
 & \iiint e dx dy dz + (e + p) v_x dy dz dt + (e + p) v_y dx dz dt + (e + p) v_z dx dy dt = 0.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Интегралы в формулах (3) следует понимать как поверхностные интегралы второго типа, т. е. как интегралы по ориентированной поверхности. В резуль-

тате применения теоремы о среднем соотношения (3) приводят к уравнениям следующего вида:

$$\left\{ \begin{array}{l} R_1^* = R_1 + \frac{\tau}{S} \left( R_1^{(1)} v_x^{(1)} - R_1^{(3)} v_x^{(3)} + R_1^{(2)} v_y^{(2)} - R_1^{(4)} v_y^{(4)} + R_1^{(5)} v_z^{(5)} - R_1^{(6)} v_z^{(6)} \right), \\ R_2^* = R_2 + \frac{\tau}{S} \left( R_2^{(1)} v_x^{(1)} - R_2^{(3)} v_x^{(3)} + R_2^{(2)} v_y^{(2)} - R_2^{(4)} v_y^{(4)} + R_2^{(5)} v_z^{(5)} - R_2^{(6)} v_z^{(6)} \right), \\ R_1^* v_x^* = R_1 v_x + \frac{\tau}{L} \left( \left( P^{(1)} + R_1^{(1)} v_x^{(1)2} \right) - \left( P^{(3)} + R_1^{(3)} v_x^{(3)2} \right) \right), \\ R_1^* v_y^* = R_1 v_y + \frac{\tau}{L} \left( \left( P^{(2)} + R_1^{(2)} v_y^{(2)2} \right) - \left( P^{(4)} + R_1^{(4)} v_y^{(4)2} \right) \right), \\ R_1^* v_z^* = R_1 v_z + \frac{\tau}{L} \left( \left( P^{(5)} + R_1^{(5)} v_z^{(5)2} \right) - \left( P^{(6)} + R_1^{(6)} v_z^{(6)2} \right) \right), \\ E^* = E + \frac{\tau}{L} \left( \left( E^{(1)} + P^{(1)} \right) v_x^{(1)} - \left( E^{(3)} + P^{(3)} \right) v_x^{(3)} + \left( E^{(2)} + P^{(2)} \right) v_y^{(2)} - \right. \\ \left. - \left( E^{(4)} + P^{(4)} \right) v_y^{(4)} + \left( E^{(5)} - P^{(5)} \right) v_z^{(5)} - \left( E^{(6)} + P^{(6)} \right) v_z^{(6)} \right). \end{array} \right. \quad (4)$$

Полученные формулы имеют совершенно ясный физический смысл и определяют потоки массы несущей фазы и примеси, а также потоки импульса и энергии через плоскую поверхность. В системе уравнений (4) буквы с верхним индексом обозначают величины газодинамических параметров на соответствующем значению индекса гранях. Буквы со звездочкой обозначают значения параметров внутри ячеек через время  $\tau$ . От обычной газодинамической схемы система (4) отличается наличием уравнения для концентрации и описанным в предыдущем разделе специальным видом уравнения состояния, зависящим от концентрации и, таким образом, учитывающим влияние дисперсной фазы на атмосферный поток.

В рамках заданных условий наша задача состоит в вычислении значений всех параметров внутри расчетной области через некоторое заданное время  $\tau$ . Общая схема расчета одного шага по времени, т. е. перехода от состояния задачи на момент времени  $t_0$  к состоянию на момент  $t_0 + \tau$ , в общем случае состоит из трех основных этапов. На первом рассчитывается значение термодинамических параметров газа на всех гранях ячеек в нашей сформированной расчетной области как решение соответствующей задачи Римана. Затем производится поиск максимального шага по времени  $\tau$ , удовлетворяющий условию устойчивости Куранта – Фридрихса – Леви (*Рождественский, Яненко, 1978*). И окончательно пересчитываются газодинамические величины во всех ячейках на новом временном слое с использованием законов сохранения с шагом по времени, гарантирующим устойчивость расчета.

Для завершения описания метода приведем алгоритм вычисления потоковых величин. Значения гидродинамических параметров в соседних ячейках принимаются за начальные условия одномерной задачи Коши для двух бесконечных масс газа. Концентрации дисперсной фазы, постоянные в каждом

из газов, принимаются постоянными на протяжении шага по времени, и, следовательно, эффективные значения показателя политропы будут также оставаться постоянными на протяжении расчетного шага по времени. Таким образом, проблема сводится к решению задачи произвольного разрыва для двух политропных газов с разными показателями политропы (задача Коши с постоянными начальными условиями или задача Римана, решение которой хорошо известно, — *Billett, Toro, 1997; Ландау, Лифшиц, 1988; Кочин* и др., 1963).

Описанная выше разностная схема имеет первый порядок точности, поскольку в данной работе авторы ставили перед собой задачу лишь показать плодотворность использования замороженной схемы Нигматулина в разностной схеме годуновского типа для описания процессов обтекания сложной поверхности запыленными атмосферными потоками. Безусловно, порядок точности может быть повышен использованием хорошо известных процедур реконструкции (*Куликовский* и др., 2001). Суть использованного метода Годунова заключается в применении обобщенных решений задачи распада произвольного разрыва при дискретизации исходных уравнений на каждом временном шаге. Наличие тангенциальных разрывов в решении задачи Римана обеспечивает диссипацию кинетической энергии, как это необходимо для течений в пограничном слое, хотя указанные разрывы и не проявляются на масштабах среднего течения. Качественное описание эффектов молекулярной вязкости обеспечивается структурой используемой разностной схемы благодаря наличию диффузионного механизма для областей с высокой энтропией по всем пространственным координатам. При значительном изменении рельефа поверхности в областях, где нагруженная часть атмосферного потока граничит с областями чистой атмосферы, влияние схемной вязкости проявляется наиболее заметно, что хорошо согласуется с влиянием молекулярной вязкости на реальные атмосферные течения. Величина схемной вязкости обуславливается градиентами подсеточных течений, существенно зависит от выбранного размера сетки и имеет конечный предел при ее измельчении. Проявление схемной вязкости при обтекании областей высокой плотности внутри атмосферного течения обеспечивает качественное моделирование существенно турбулентных эффектов, характерных для сложных многофазных течений, которые при других подходах нуждаются в параметризации.

### 3. ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТОСПОСОБНОСТИ МОДЕЛИ

В этом разделе приводится сравнительный анализ экспериментальных данных, представленных в работе (*Dawson et al., 1991*), со значениями, полученными в расчетах на основе предлагаемой в данной работе модели. В работе (*Dawson et al., 1991*) приведены результаты двух проводившихся авторами экспериментов. В первом из них найдено распределение примеси при обтекании потоком кубического тела 1 (рис. 1) в аэродинамической трубе, скорость потока, турбулентная интенсивность и изменение плотности примеси в различных направ-

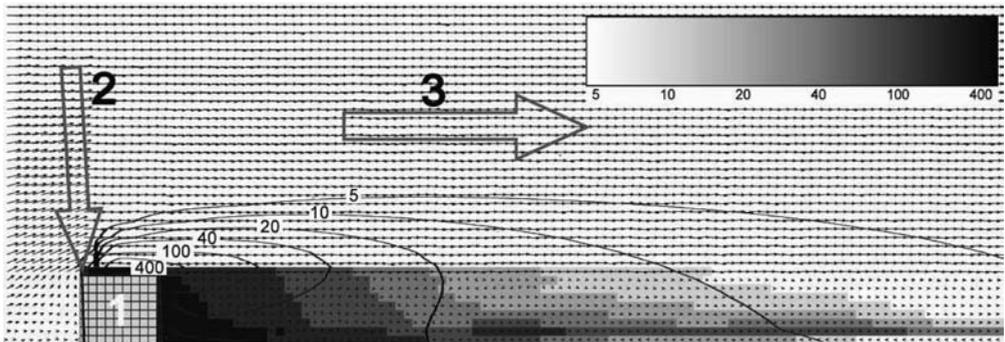


Рис. 1. Разрез трубы вдоль линии тока газа. 1 — кубическое тело; 2 — область эмиссии примеси; 3 — направление движения потока газа

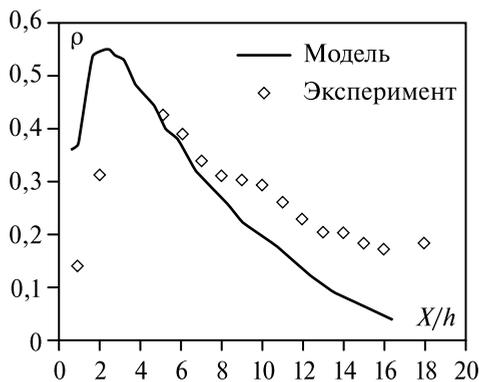
лениях. Обтекаемое тело представляло собой 0,18-метровый куб, помещенный в тоннель высотой 1,8 м. Скорость потока менялась по логарифмическому закону от 0 (снизу тоннеля) до 1,46 м/с (сверху). Поток газа двигался справа на лево, примесь эмитировалась из верхней левой части куба 2.

Сплошные линии показывают границы областей, где плотность примеси внутри больше, чем значение, указанное на границе. Области, ограниченные этими линиями, получены экспериментально (Dawson et al., 1991). Цифрами показано абсолютное значение плотности примеси вдоль линии. Области, закрашенные оттенками серого цвета (от черного до светло-серого), рассчитаны на основе предлагаемой модели. Соответствие оттенка определенной плотности примеси можно увидеть в верхнем правом углу каждого рисунка. Значения плотности указаны в  $\text{мг/м}^3$ .

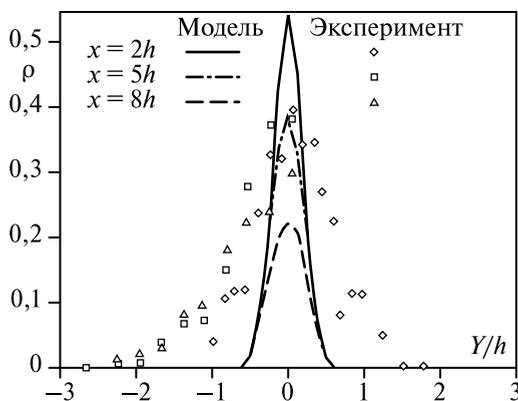
На рис. 2–4 сравнивается распределение безразмерной концентрации примеси по длине, ширине и высоте расчетной области в соответствии с полученными экспериментальными данными. Различными линиями (сплошной, прерывистой, штрихпунктирной) показано модельное распределение, а дискретными метками (ромбами, квадратами, треугольниками) — распределение, полученное из эксперимента. Параметр  $x = 2h$ ,  $x = 5h$ ,  $x = 8h$  обозначает безразмерное расстояние в длинах ребра куба ( $h$ ) от центра тела до места измерения концентрации примеси вдоль области счета по соответствующему направлению (ось  $X$  — рис. 3, ось  $Y$  — рис. 4, ось  $Z$  — рис. 2).

Как видно из представленных графиков, результаты моделирования хорошо отражают все качественные особенности экспериментальных распределений. Количественные расхождения следует относить на реальную полидисперсность твердой фазы, не принимаемую во внимание в расчетах.

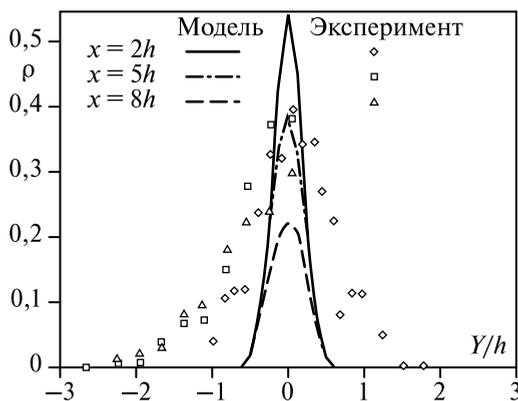
Работоспособность предлагаемой модели также была проверена на основе сравнения с натурными экспериментами (Dawson et al., 1991) по исследованию распределения концентрации примеси при обдувании природного образования (холм Steptoe Butte) потоком воздуха с примесью газа. Этот холм представляет



**Рис. 2.** Распределение безразмерной концентрации примеси по вертикальной оси (ось  $Z$ ) в трех различных точках: на расстояниях  $2h$ ,  $5h$ , и  $8h$  от центра куба соответственно;  $h$  — размер ребра обтекаемого куба



**Рис. 3.** Распределение безразмерной концентрации примеси по горизонтальной оси (ось  $X$ )



**Рис. 4.** Распределение безразмерной концентрации примеси по оси  $Y$  в трех различных точках: на расстояниях  $2h$ ,  $5h$ , и  $8h$  от центра куба соответственно

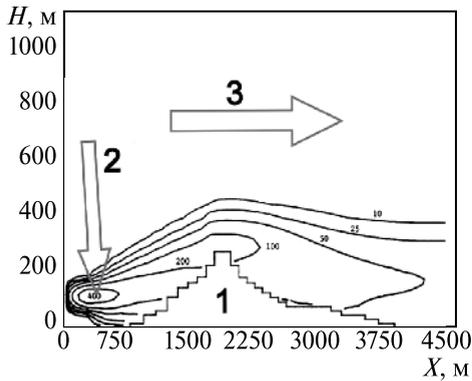


Рис. 5. Экспериментальное распределение

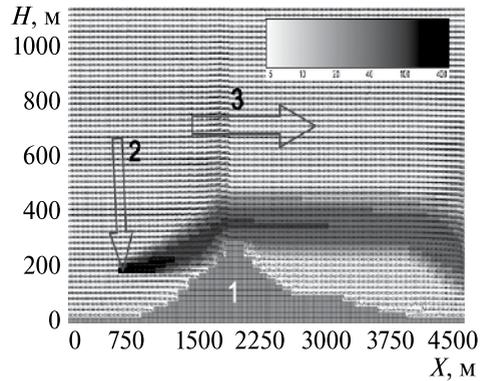


Рис. 6. Модельное распределение

собой 330-метровый изолированный приблизительно осесимметричный конус. Основной диаметр холма  $\sim 3400$  м, наклон поверхности  $\sim 20\%$  в верхней части холма. Источник эмиссии газа 2 (рис. 5, 6) был расположен на высоте  $H = 122$  м от основания и на расстоянии 1,5 км от вершины холма с наветренной стороны.

На рис. 5, 6 показаны распределения примеси в вертикальном продольном сечении через вершину конуса препятствия, по оси вдоль движения потока воздуха. Цифрами обозначены: 1 — холм, 2 — область эмиссии примеси, 3 — движение в направлении воздушного потока.

Линии на рис. 5 показывают границы областей, в которых плотность примеси внутри больше, чем значение, указанное на границе. Области, ограниченные этими линиями, получены экспериментально (Dawson et al., 1991). Цифры обозначают абсолютное значение плотности примеси вдоль линии. На рис. 6 области, закрашенные оттенками серого цвета (от черного до светло-серого), рассчитаны на основе предлагаемой модели.

Полученные результаты свидетельствуют о применимости предлагаемой модели в пределах точности, определяемой погрешностью измерений, и недостаточной информации о реализованных начальных условиях. Вообще говоря, от численных моделей при сравнении с подобными натурными экспериментами можно требовать хорошего количественного совпадения только в среднем по ансамблю достаточного количества опытов со сходными начальными условиями.

На рис. 7 представлена сложная подстилающая поверхность 2. Примесь постоянным потоком вдувается слева направо. Плотность примеси на части левой границы расчетной области постоянна и равна  $\rho = 0,01$  кг/м<sup>3</sup>. Направление воздушного потока 3 слева направо, начальная скорость движения внутри области счета  $V = 20$  м/с. Граничные условия (давление, температура) справа и слева от расчетной области одинаковы, вертикальная компонента скорости газа в этих ячейках отсутствует. Горизонтальная компонента скорости потока во всех ячейках левой и правой границ одинакова и равна 20 м/с. Сверху расчетная область открыта. На рис. 8 приведен вертикальный профиль  $x$ -компоненты скорости в

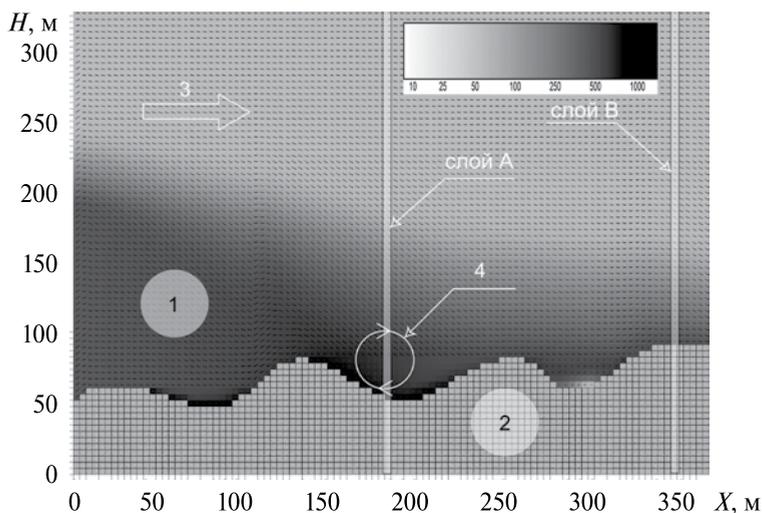


Рис. 7. Размер всей области  $75 \times 100$  ячеек, размер каждой ячейки  $4 \times 4$  м

различных слоях. Как известно, вблизи земной поверхности скорость потока существенно ослабляется под влиянием сил трения и так называемого «прилипания», т. е. обращения скорости ветра в нуль на земной поверхности и в тонком слое (слой шероховатости; Матвеев, 1976). Скорость ветра на шероховатой поверхности обращается в нуль по чисто механической причине: молекулы воздуха (равно как и любого другого газа) соударяются с неровностями поверхности и, естественно, теряют скорость поступательного движения. Настоящая работа посвящена моделированию движения потока в пограничном слое, т. е. в нижнем слое атмосферы, начинающемся от земной поверхности, свойства которого в основном определяются динамическими и термическими воздействиями этой поверхности. Толщина пограничного слоя атмосферы обычно от 300–400 до 1500–2000 м, в среднем около 1000 м. Она тем больше, чем больше

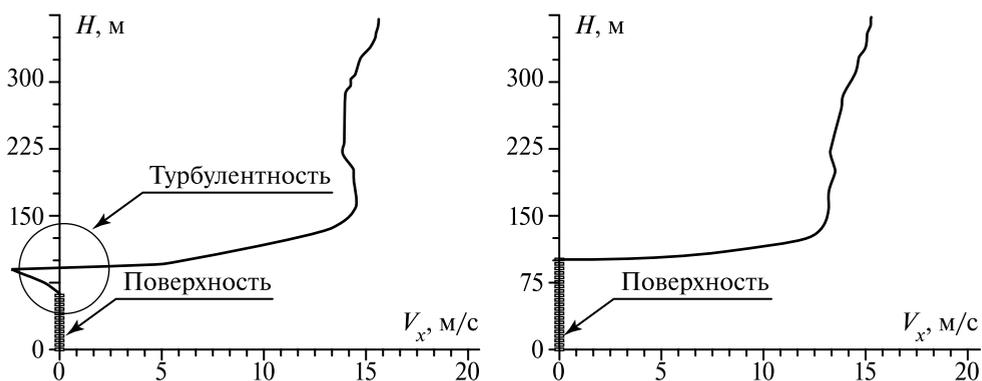


Рис. 8. Профиль  $x$ -компоненты скорости в различных слоях

шероховатость земной поверхности и чем интенсивнее развитие турбулентности, а потому увеличивается с усилением ветра и с уменьшением устойчивости стратификации. Вследствие уменьшения с высотой турбулентного трения скорость ветра в пограничном слое возрастает с высотой, приближаясь к скорости градиентного ветра на верхней границе пограничного слоя. В нижней части пограничного слоя (в приземном слое) скорость ветра растет с высотой приблизительно по логарифмическому закону (Обухов, 1988; Прандтль, 2000) (пропорционально логарифму высоты). В нашем случае нижний монотонный участок графиков достаточно хорошо аппроксимируется логарифмическим профилем, что согласуется с теоретическими представлениями. На рис. 8 хорошо заметна возникшая вихревая структура.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Чтобы проиллюстрировать возможности предложенной модели, был проведен ряд модельных численных расчетов, направленных на выявление основных эффектов, которые описываются моделью. Наглядно показано существенное влияние примеси на характер течения, формирование пограничного слоя вследствие схемной вязкости и неоднородности подстилающей поверхности. Расчеты проводились для различных типов препятствий и были ориентированы на земной тип условий. Скорость ветра составила от  $\sim 10$  до  $\sim 30$  м/с, давление — 100 000 Па, плотность среды —  $1,2$  кг/м<sup>3</sup>. Плотность примеси изменялась в широком диапазоне: от 0,000001 до 1 кг/м<sup>3</sup>. Во всех случаях размеры расчетной области и препятствия выбирались из соображения, чтобы количество ячеек, отведенных под препятствие, было меньше либо порядка 10 % от общего числа ячеек расчетной области. Это связано с корректностью постановки граничных условий, в противном случае результат не представлял бы никакой практической ценности. Граничными условиями задач служили: условие непротекания на подстилающей поверхности, а также равенство параметров потока своим начальным значениям на достаточном удалении от препятствия.

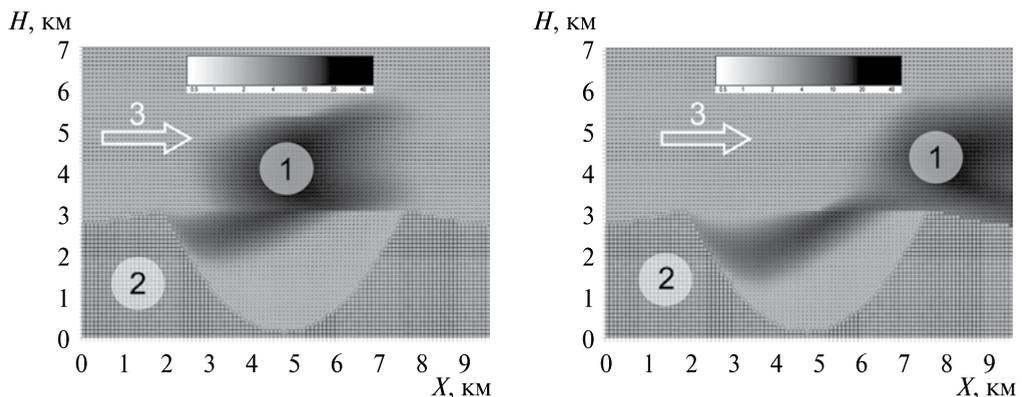
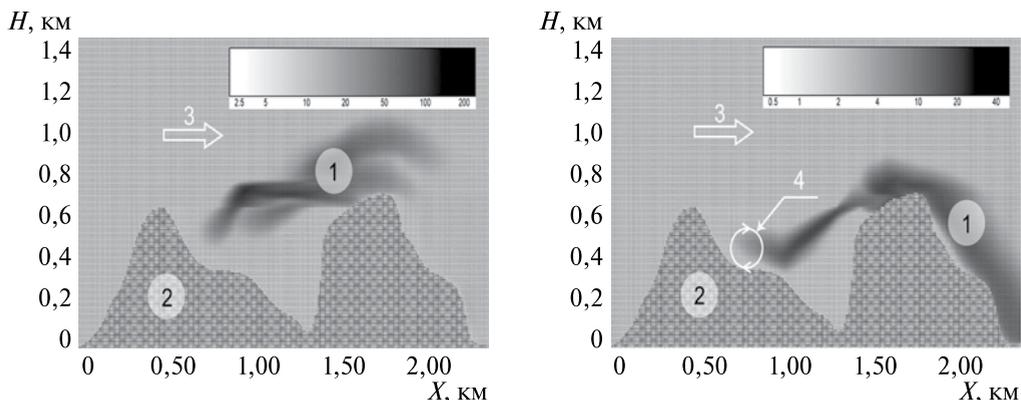


Рис. 9. Динамика движения облака примеси над «кратером» (время счета  $T_s = 70; 150$  с)



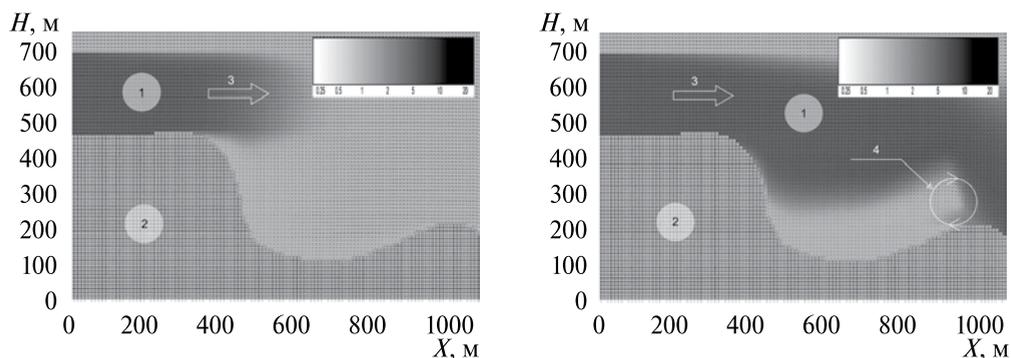
**Рис. 10.** Динамика движения пылевого облака над «горами» (время счета  $T_s = 40; 92$  с)

Нетривиальное влияние примеси (которая в экспериментах полагалась как  $\text{SiO}_2$ , т. е. песок) представлено на рис. 9, 10. В районе нахождения примеси появляются зоны увеличения и уменьшения от среднего значения вертикальной компоненты скорости. Это объясняется присутствием примеси, ибо, как было указано выше, примесь имеет активное влияние на формирование пограничного слоя.

На рис. 9 представлены картинки двумерной визуализации движения потока примеси над ландшафтом типа «кратер». Цифрами обозначены: 1 — поток примеси, 2 — элементы поверхности, 3 — направление движения воздушного потока.

На рис. 10 представлены картинки двумерной визуализации движения потока примеси над ландшафтом типа «горы». Цифрами обозначены: 1 — поток примеси, 2 — поверхность, 3 — направление движения воздушного потока, 4 — области завихрения

На рис. 11, 12 представлены картинки двумерной визуализации движения потока примеси над ландшафтом типа «обрыв». Цифрами обозначены: 1 — поток



**Рис. 11.** Введение примеси в расчетную область:  $T_s = 8$  с (слева);  $T_s = 41$  с (справа). Дальнейшая нагрузка примесью приводит к завихрению

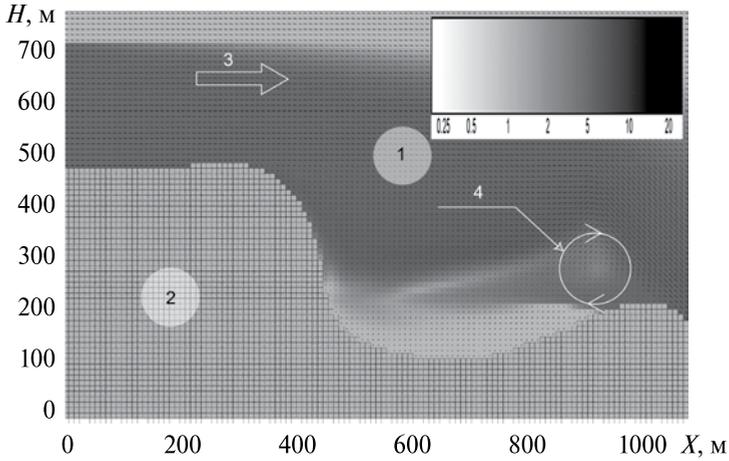


Рис. 12. Увеличение завихрения:  $T_s = 80$  с

примеси, 2 — поверхность, 3 — направление движения воздушного потока, 4 — области завихрения.

«Обрыв» представляет собой расчетную область размером  $75 \times 120$  ячеек. Размер каждой ячейки составляет  $10 \times 10$  м. Примесь постоянным потоком втекает в левую грань расчетной области. Плотность вносимой примеси на левой границе расчетной области постоянна и равна  $\rho = 0,001$  кг/м<sup>3</sup>. Направление воздушного потока 3 — слева направо, начальная скорость движения внутри области счета  $V = 30$  м/с. Граничные условия (давление, температура) справа и слева от расчетной области одинаковы, вертикальная компонента скорости газа в этих ячейках отсутствует, горизонтальная компонента меняется по логарифмическому закону от 0 (снизу расчетной области) до 30 м/с (сверху расчетной области). Сверху расчетная область открыта.

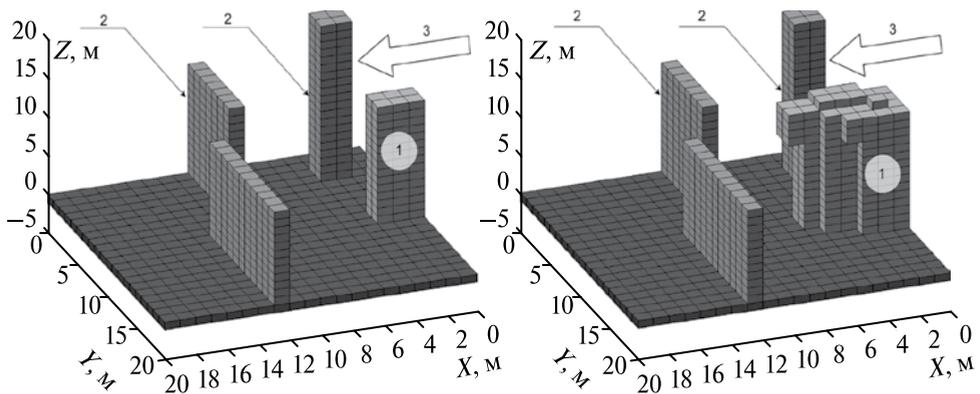
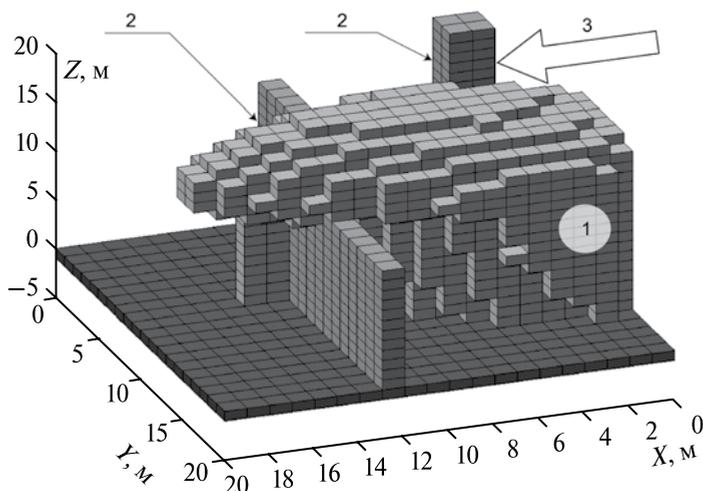


Рис. 13. Трехмерная динамика движения облака над подстилающей поверхностью урбанистического типа:  $T_s = 2$  с, 10 с



**Рис. 14.** Трехмерная динамика движения облака над подстилающей поверхностью урбанистического типа:  $Ts = 40c$

Для всех рассмотренных случаев (см. рис. 9–12) соответствие оттенка определенной плотности примеси можно увидеть в верхних частях рисунков.

На рис. 13, 14 представлена трехмерная визуализация динамики плотности примеси, переносимой ветровым потоком над ландшафтом урбанистического типа. Цифрами обозначены: 1 — поток примеси, 2 — элементы ландшафта, 3 — направление движения воздушного потока.

Размер расчетной области  $20 \times 20 \times 20$  ячеек, размер каждой ячейки  $10 \times 10 \times 10$  м. Граничные условия (давление, температура) на правой и левой гранях расчетной области одинаковы. Вертикальная и поперечная компонента скорости газа в этих ячейках отсутствует, горизонтальная компонента меняется по логарифмическому закону от 0 м/с снизу расчетной области до 10 м/с (движение потока справа налево) сверху расчетной области. Сверху расчетная область открыта. Примесь в нее попадает через правую грань. Плотность примеси постоянна на границе и равна  $\rho = 0,001 \text{ кг/м}^3$ . Граница облака представляет собой поверхность с одинаковым значением на ней плотности примеси. В случаях, изображенных на рис. 11, 12, она составляет  $\rho = 0,001 \text{ кг/м}^3$ .

### Заключение

В данной работе предложена трехмерная модель обтекания атмосферным течением, нагруженным твердой дисперсной фазой, сложной подстилающей поверхности. Эта модель базируется на двух физических идеях: описании двухфазных атмосферных течений на основе уравнений Нигматулина (уравнения идеального газа с пересчитанным уравнением состояния) и использовании обладающего схемной вязкостью метода Годунова. Реализация этих идей позволяет численно решить модельные уравнения. Основное преимущество

предложенной модели состоит в возможности моделирования двухфазных атмосферных течений в областях, в которых вертикальный масштаб неоднородности больше горизонтального масштаба. Обычно в этих случаях традиционные методы моделирования крупных вихрей и методы, основанные на усреднении по Рейнольдсу, неприемлемы.

Следует отметить, что результаты моделирования, согласно предложенной модели, зависят от способа дискретизации задачи, хотя схемная вязкость имеет конечный предел, что является неоспоримым преимуществом по сравнению с моделями крупных вихрей, в которых, как хорошо известно, результаты моделирования не критичны к способу параметризации подсеточных явлений.

В настоящей работе показано, что наличие двух механизмов схемной вязкости разработанного алгоритма, а именно наличие неоднородностей поверхности и градиентов концентраций твердой примеси, позволяет воспроизвести динамику переноса примеси. Результаты математического моделирования, приведенные в этой работе, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

### Литература

- Алоян А. Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2008.
- Арутюнян Г. М.* Термогидродинамическая теория гетерогенных систем. М.: Физматлит, 1994.
- Арутюнян Г. М.* Условия применимости результатов гидродинамики совершенного газа к дисперсным средам // Изв. АН СССР. МЖГ. 1979. № 1. С. 157–160.
- Глазунов А. В.* Вихреразрешающее моделирование турбулентности с использованием смешанного динамического локализованного замыкания. Ч. 1. Формулировка задачи, описание модели и диагностические численные тесты // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2009а. Т. 45. № 1. С. 29–42.
- Глазунов А. В.* Вихреразрешающее моделирование турбулентности с использованием смешанного динамического локализованного замыкания. Ч. 2. Численные эксперименты; моделирование турбулентности в канале с шероховатыми границами // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2009б. Т. 45. № 1. С. 7–28.
- Годунов С. К.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
- Гришин А. М., Фомин В. М.* Сопряженные и нестационарные задачи механики реагирующих сред. Новосибирск: Наука, 1984. 318 с.
- Зилитинкевич С. С.* Динамика пограничного слоя атмосферы. Л: Гидрометеоздат, 1970.
- Кочин Н. Е., Кибель И. А., Розе Н. В.* Теоретическая гидромеханика. М.: Физматлит. 1963.
- Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.

- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. IV. Гидродинамика. М.: Наука, 1988.
- Матвеев Л. Т. Курс общей метеорологии. Физика атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1976.
- Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Наука. Физматлит, 1987.
- Обухов А. М. Турбулентность и динамика атмосферы Л. Гидрометеиздат, 1988.
- Овсянников Л. В. Лекции по основам газовой динамике. М.: Наука, 1981.
- Прандтль Л. Регулярная и хаотическая механика. Ижевск: НИЦ Гидроаэронавтика, 2000.
- Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н. Системы квазилинейных уравнений и их приложение в газовой динамике. М.: Наука. 1978.
- Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т. 1; 2. М.: Наука, 1984.
- Billett S. J., Toro E. F. On WAF-Type Schemes for Multidimensional hyperbolic conservation laws // J. Computational Physics. 1997. V. 130. P. 1–24.
- Dawson P., Stock D. E., Lamb B. The numerical simulation of airflow and dispersion in three-dimensional atmospheric recirculation zones // J. American Meteorological Society. 1991.
- Hikel S., Adams N. A., Andrzej D. An adaptive local deconvolution method for implicit LES // J. Computational Physics. 2006. V. 213. P. 413–436.
- Hikel S., Adams N. A., Mansour N. N. Implicit subgrid-scale modeling for large-eddy simulation of passive-scalar mixing // Physics of fluids. 2007. V. 19. P. 95–102.
- Hikel S., Adams N. A. On implicit subgrid-scale modeling in wall-bounded flows // Physics of fluids. 2007. V. 19. P. 105–106.
- Hikel S., Adams N. A., Franz S. Implicit subgrid-scale modeling by adaptive deconvolution // J. Computational Physics. 2004. V. 200. P. 412–431.
- Lebedev I., Lykosov V. N., Lutsenko E. V. Large-Eddy Simulation of Convective Boundary Layer Using Explicit Difference Schemes // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2000. V. 15. Nr. 1. P. 95–110.

### THREE-DIMENSIONAL MODEL OF TRANSPORT AN ATMOSPHERIC ADMIXTURE BY WIND IN RANGE WITH COMPLEX BOUNDARY.

K.V. Karelsky, A.S Petrosyan, I.V. Smirnov

*Space Research Institute of the Russian Academy of Sciences,*

New physical model of transporting atmospheric admixture by wind flow above a range with complex or changing in time boundary is created and realized in this paper. System of nonviscosity equations of atmosphere, based of Nigmatulin's model of effective thermodynamic characteristic for «frozen» disperse phase is solved by the Godunov's method. The structure of using finite difference scheme provides diffusion of range with high entropy in all spatial coordinates and shows qualitatively the effect of molecular viscosity. The influence of system viscosity shows most weightily when boundary layer is loaded by solid particles in range with considerably changes of the surface relief.

## СТРУКТУРА ПАССИВНОГО СКАЛЯРА В ПЕРИФЕРИЙНОЙ ОБЛАСТИ СЛУЧАЙНОГО ПОТОКА

В. Лебедев<sup>1</sup>, А. Черных<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Учреждение Российской академии наук Институт теоретической физики  
им. Л.Д. Ландау РАН E-mail: lwlebede@gmail.com

<sup>2</sup> Учреждение Российской академии наук Институт автомататики  
и электрометрии Сибирского отделения РАН

<sup>3</sup> Новосибирский государственный университет. E-mail: chernykh@iae.nsk.su

Исследуются статистические свойства пассивного скаляра в периферийной области случайного потока в предположении слабости его диффузии. На далекой по времени стадии смешения неперемешанный остаток концентрируется в узком диффузионном слое вблизи стенки. Проведено численное моделирование, и найдены структуры, отвечающие за перенос пассивного скаляра в объем и представляющие собой узкие языки, вытягивающиеся из диффузионного слоя. Концентрация пассивного скаляра, усредненная вдоль стенки, имеет хорошо выраженный скейлинг. Предложена теория, дающая степени моментов интегрального пассивного скаляра, которые хорошо согласуются с найденными численно в трехмерном случае. Работа частично поддержана РФФИ (проект № 06-02-17408-а) и грантом президента России по поддержке научных школ № НШ-4930.2008.2.

Стохастическая динамика таких полей, как температура или концентрация примеси в случайных потоках, важна в различных физических ситуациях — от космологии до микрогидродинамики. Говоря о случайном потоке, мы имеем в виду турбулентный (Монин, Яглом, 1965; Frisch, 1995) или хаотический поток (Ottino, 1989). Промежуточное положение между турбулентным и хаотическим потоком занимает так называемая эластичная турбулентность (Groisman, Steinberg, 2001). Главное влияние случайного потока состоит в перемешивании, ведущем к существенному ускорению выравнивания температуры или концентрации. Наш анализ может быть распространен на химические реакции, которые ускоряются в случайном потоке благодаря тому же влиянию перемешивания (Friedlander, Keller, 1976).

Если обратное влияние поля на поток пренебрежимо, то такое поле представляет собой пассивный скаляр. Динамические и статистические свойства пассивного скаляра в случайном потоке активно изучаются последние два десятилетия экспериментально, теоретически и численно (Sreenivasan, Antonia, 1997; Shraiman, Siggia, 2000; Falkovich et al., 2001; Yeung, 2002; Schumacher, Sreenivasan, 2005; Kantsler, Steinberg, 2005; Miller et al., 2008). Было показано, что пассивный скаляр имеет сложную статистику, при этом демонстрировались такие особенности, как мультифрактальность и перемежаемость. Эти свойства есть следствие сложного взаимодействия диффузии и случайного переноса, влияющих на эволюцию пассивного скаляра.

Поле пассивного скаляра  $\theta$  во внешнем потоке описывается уравнением

$$\partial_t \theta + \mathbf{v} \nabla \theta = \kappa \nabla^2 \theta, \quad (1)$$

где  $\mathbf{v}$  — скорость потока;  $\kappa$  — коэффициент диффузии (температуропроводности). Уравнение (1) должно быть дополнено граничным условием на стенке, которое сводится к равенству нулю градиента плотности для примеси или к заданию значения  $\theta$  для температуры. Далее мы предполагаем, что числа Пекле или Шмидта велики (т. е.  $\kappa$  мало по сравнению с кинематической вязкостью жидкости  $\mu$ ). Будем также считать, что жидкость несжимаема ( $\nabla \mathbf{v} = 0$ ).

В данной работе исследуется статистика пассивного скаляра на периферии сосуда, в объеме которого возбуждено развитое турбулентное или хаотическое течение. Говоря о периферии, мы имеем в виду ламинарный (вязкий) подслой, сформировавшийся вблизи стенки, где поле скорости можно считать гладким, изменяющимся на расстояниях порядка толщины вязкого подслоя и случайным по времени. При этом мы интересуемся поздней стадией перемешивания пассивного скаляра, когда неперемешанная часть скаляра (или непрореагировавшие реагенты) локализованы в основном в периферической области у стенки сосуда. То же относится и к статистически стационарной ситуации, связанной, например, с постоянным тепловым потоком через стенку. Теоретический подход к задаче развит в работах (*Chertkov, Lebedev, 2003; Lebedev, Turitsyn, 2004; Schekochihin et al., 2004; Salman, Haynes, 2007*). Его общие предсказания подтверждаются экспериментами по смешиванию с эластической турбулентностью (*Burghlea et al., 2004*).

Так как числа Пекле или Шмидта предполагаются большими, пассивный скаляр на периферии эволюционирует медленно по сравнению с объемом. Поэтому на начальной стадии пассивный скаляр хорошо перемешан в объеме, что приводит к однородному распределению с  $\theta = \text{const}$ . Мы предполагаем, что объем можно рассматривать как большой резервуар, так что константа практически не зависит от времени. Ниже будем предполагать, что поле пассивного скаляра сдвинуто на эту константу и в результате  $\theta = 0$  в объеме. После начальной стадии заметная эволюция пассивного скаляра происходит только в периферийной области. На этой стадии неперемешанный пассивный скаляр сконцентрирован преимущественно в узком диффузионном слое вблизи стенки, толщина которого меньше толщины периферийной области (*Chertkov, Lebedev, 2003; Lebedev, Turitsyn, 2004*). Далее перенос пассивного скаляра в объем происходит через ту часть периферийной области, которая находится вне диффузионного подслоя. Таким образом, периферийная область играет значительную роль в формировании статистических характеристик переноса. Заметим, что наши предположения приводят к экспоненциальному затуханию пассивного скаляра (*Lebedev, Turitsyn, 2004*). Степенное затухание, наблюдавшееся в эксперименте (*Gouillart et al., 2007*), вероятно, связано с экспериментальным устройством, в котором объем не может рассматриваться как большой резервуар.

Предположим, что стенки сосуда гладкие и что толщина пограничного слоя много меньше радиуса кривизны стенок. Тогда в главном приближении стенки

можно считать плоскими. Введем систему координат с осью  $z$ , перпендикулярной стенке и направленной в сторону жидкости. Гладкость поля скорости ведет к законам пропорциональности  $v_x, v_y \propto z$  и  $v_z \propto z^2$  для компонент скорости, направленных вдоль стенки и перпендикулярно к ней соответственно. Эти законы есть следствие условия прилипания к стенке  $\mathbf{v} = 0$  и условия несжимаемости  $\nabla \mathbf{v} = 0$ . Предположим, что статистика поля скорости однородна как по времени, так и вдоль стенки. Однако его статистика неоднородна вдоль оси  $z$  и сильно анизотропна.

Так как скорость при приближении к стенке стремится к нулю и диффузия предполагается слабой, динамика пассивного скаляра в периферийной области, определяемая совместным действием переноса и диффузии, медленнее, чем динамика поля скорости. Поэтому при исследовании пассивного скаляра поле скорости может считаться коротко коррелированным по времени и для корреляционных функций пассивного скаляра могут быть выведены замкнутые уравнения (см., например, *Falkovich et al., 2001; Lebedev, Turitsyn, 2004*). Например, для первого момента  $\theta$ ,  $\langle \theta \rangle$  (где угловые скобки означают усреднение по времени) в работе (*Lebedev, Turitsyn, 2004*) получено

$$\partial_t \langle \theta \rangle = \partial_z (\mu z^4 \partial_z \langle \theta \rangle) + \kappa \partial_z^2 \langle \theta \rangle, \quad (2)$$

где второй член вызван случайным переносом, его зависимость от  $z$  связана с законом  $v_z \propto z^2$  и множитель  $\mu$  характеризует силу флуктуаций скорости.

Сравнивая конвективный и диффузионный члены в уравнении (2), находим характеристическую диффузионную длину  $r_{bl} = (\kappa/\mu)^{1/4}$ . Благодаря малости  $\kappa$  эта длина много меньше толщины периферийной области. На поздней стадии перемешивания пассивного скаляра или в статистически стационарной ситуации (при постоянном потоке пассивного скаляра через стенку) пассивный скаляр концентрируется преимущественно в пограничном слое при  $z \leq r_{bl}$ . Мы же интересуемся переносом пассивного скаляра через область  $z > r_{bl}$ , через которую пассивный скаляр переносится из диффузионного пограничного слоя в объем. Здесь можно пренебречь диффузионным членом в уравнении (2) и получить закон  $\langle \theta \rangle \propto z^{-3}$ .

Для проверки теоретических предсказаний было проведено численное моделирование задачи. Использовался метод, в котором вычислялись траектории большого числа частиц, подверженных одновременному действию переноса потоком, и ланжевеновской силы. Облако частиц использовалось вместо поля пассивного скаляра  $\theta$ , которое рассматривалось как плотность числа частиц. Важное преимущество такого подхода состоит в возможности проводить моделирование в пространстве произвольной размерности  $d$ .

Для установления основных количественных особенностей переноса пассивного скаляра проводилось в основном 2D-моделирование. Поле скорости выбиралось периодическим по  $x$  (координата вдоль стенки) и имело вид

$$\begin{aligned} v_x &= z \left[ \xi_1 \cos(2\pi x/L) + \xi_2 \sin(2\pi x/L) \right] L / \pi, \\ v_z &= z^2 \left[ \xi_1 \sin(2\pi x/L) - \xi_2 \cos(2\pi x/L) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

где  $L$  — период (мы использовали  $L = 10$ );  $\xi_1$  и  $\xi_2$  — независимые случайные функции от времени. Это поле скорости удовлетворяет условию неразрывности  $\partial_x v_x + \partial_y v_y = 0$  для любых функций  $\xi_1(t)$  и  $\xi_2(t)$ . Эти случайные амплитуды представляют собой гауссовы случайные процессы, что обеспечивает статистическую однородность поля скорости (3) по  $x$  (вдоль стенки). Поскольку время корреляции скорости много меньше времени перемешивания пассивного скаляра, нужно предположить, что  $\xi_1(t)$  и  $\xi_2(t)$  коротко коррелированы по времени. Мы моделировали эти функции телеграфными процессами, где обе функции  $\xi_1(t)$  и  $\xi_2(t)$  остаются постоянными внутри интервала времени малой продолжительности  $\tau$ , а значения  $\xi_1$  и  $\xi_2$  выбраны случайными с идентичными нормальными распределениями. В нашем численном моделировании выбиралось  $\langle \xi_1^2 \rangle = \langle \xi_2^2 \rangle = 1$ , что дает  $\mu = \tau/2$ .

В нашей схеме траектория частицы удовлетворяет уравнению  $\partial_t \rho = \mathbf{v}(t, \rho) + \zeta(t)$ , где  $\rho = (\rho_x, \rho_z)$  — вектор, задающий положение частицы, первый член справа представляет собой перенос частицы гидродинамическим потоком, а второй — ланжевеновскую силу. Подчеркнем еще раз, что переменные  $\zeta$  независимы для разных частиц, а переменные  $\xi_1$  и  $\xi_2$  одинаковы для всех в соответствии с их физическим смыслом. Переменные  $\zeta$  также моделировались телеграфными процессами с той же длительностью ступеньки  $\tau$  и с нормальным распределением высоты ступенек. Для получения данного коэффициента диффузии  $\kappa$  необходимо задать  $\langle \zeta_x^2 \rangle = \langle \zeta_y^2 \rangle = 2\kappa/\tau$ . В численном моделировании в основном выбирались  $\kappa = \tau/2$ , и, следовательно, диффузионная длина составляла  $r_{bl} = 1$ .

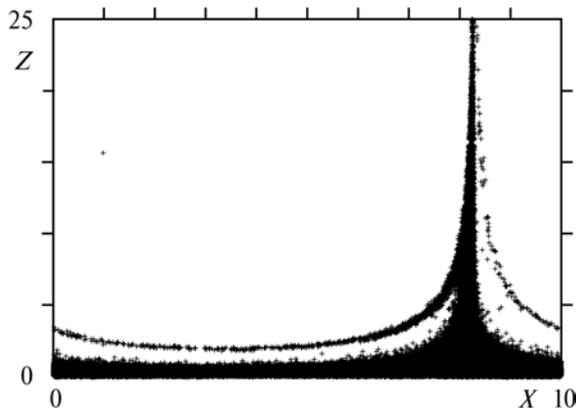
Внутри интервала  $\tau$  все  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  и  $\zeta$  постоянны и уравнение  $\partial_t \rho = \mathbf{v}(t, \rho) + \zeta(t)$  становится автономным обыкновенным дифференциальным уравнением, которое решалось следующим образом. Интервал  $\tau$  делился на некоторое число меньших интервалов, и в уравнениях, без учета ланжевеновской силы, применялся метод Рунге–Кутты второго порядка. Число интервалов зависело от  $z$ , и при  $z > 2,5$  оно росло пропорционально  $z$ . При  $z > 12$  решались уравнения для  $\rho_x$  и  $1/\rho_z$ . Обе особенности метода обусловлены сильной зависимостью скорости от  $z$ . После решения уравнений внутри интервала  $\tau$  добавлялся диффузионный сдвиг, вызванный ланжевеновской силой. Для выяснения роли диффузии вне диффузионного пограничного слоя проводились вычисления с диффузией, выключенной на расстояниях  $z > z_d$ , при различных  $z_d$  в разных случаях.

На каждом интервале по времени на стенке добавлялись новые частицы в случайных местах. Моделирование проводилось на интервале  $0 < z < 100$ . Частицы, перешедшие границы  $z = 0$  и  $z = 100$ , исключались из дальнейшего рассмотрения. Уравновешивание числа добавляемых частиц и уходящих постепенно

приводило к наступлению статистического равновесия. Таким образом, наше моделирование относилось к статистически равновесному переносу пассивного скаляра. Заметим, что оно относится как к распределению температуры у стенки при постоянном потоке тепла, так и к выравниванию концентрации примеси, которое может рассматриваться адиабатически.

Моделирование выявило особые структуры, отвечающие за перенос пассивного скаляра в объем. Пассивный скаляр переносится выбросами, направленными от стенки в объем; эти выбросы формируют языки, ширина которых убывает с ростом  $z$ . Это свойство есть следствие закона  $v_z \propto z^2$ , означающего, что  $z$ -компонента скорости языка возрастает с увеличением  $z$ . Иногда язык вытягивается на бесконечные  $z$ , что означает унос порции пассивного скаляра в объем. Затем язык загибается к стенке и прижимается к диффузионному слою. Далее вырастает новый язык, обычно из утолщения, оставшегося у стенки от предыдущего языка, и он впоследствии прижимается к диффузионному слою. В результате формируется сложная структура, пример которой показан на рис. 1, представляющем собой кадр, сгенерированный в нашем моделировании.

В представлении частиц поле пассивного скаляра  $\theta$  определяется числом частиц на единицу площади, т. е. как число частиц в ячейке, деленное на площадь ячейки. Конечно, такое определение применимо, пока в малой ячейке достаточно много частиц. Чтобы удовлетворить этим противоречивым условиям, необходимо достаточно большое число частиц. Для этого инъекция частиц у стенки поддерживалась на таком уровне, чтобы общее их число в состоянии статистического равновесия оказывалось равным  $10^5$ – $10^6$ . Статистические свойства пассивного скаляра могут быть охарактеризованы корреляционными функциями (моментами), которые при моделировании в нашем случае получались усреднением по интервалам времени  $t \sim 10^6$ – $10^7\tau$ .



**Рис. 1.** Пример структуры пассивного скаляра, сформированной у стенки случайным потоком. Частицы представлены крестиками

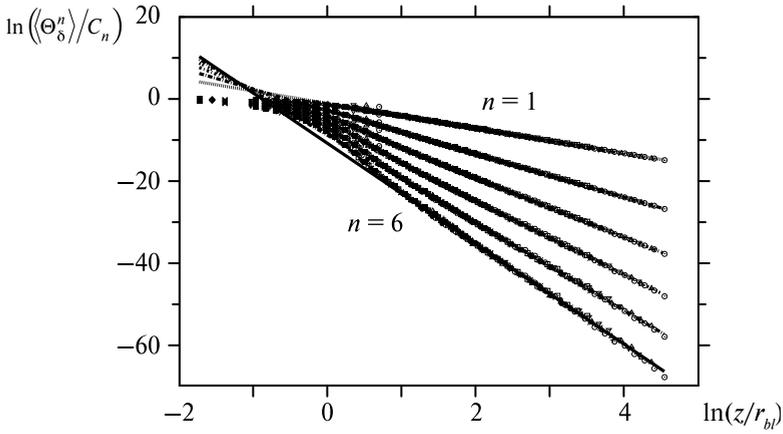
Были вычислены моменты и установлено, что закон  $\langle \theta \rangle \propto z^{-3}$  прекрасно выполняется при  $z \gg r_{bl}$ , в то время как высшие моменты спадают быстрее. Таким образом, результат не соответствовал поведению  $\propto z^{-3}$ , которое может быть получено для всех моментов  $\theta$  в предположении пренебрежения диффузией (Lebedev, Turitsyn, 2004). Основываясь на представлении о языках, можно объяснить важность диффузионного члена при  $z \gg r_{bl}$ . Действительно, член  $\kappa \nabla^2$  в уравнении (1) можно оценить как  $\kappa/l^2$ , где  $l$  — характерная ширина языка, которая убывает с ростом  $z$ . Если  $l$  убывает быстрее, чем  $z^{-1}$ , то диффузионный член оказывается существенным, что видно из сравнения его с конвективным членом в уравнении (2). Зависимость  $l$  от  $z$  есть задача отдельного исследования. В любом случае пренебрежение диффузионным членом должно быть специально обосновано. Единственное исключение — первый момент, так как диффузия в направлениях  $x, y$  выпадает из уравнения для первого момента благодаря однородности системы вдоль стенки. Чтобы исключить влияние диффузии, мы ввели другой объект  $\Theta$ , представляющий собой интеграл пассивного скаляра вдоль поверхности, параллельной стенке. Благодаря узости языков естественно ожидать, что пассивный скаляр коротко коррелирован вдоль стенки при  $z \gg r_{bl}$ . В этом случае получаем замкнутое уравнение для моментов  $\Theta$ :

$$\partial_t \langle \Theta^n \rangle = \mu \left[ z^4 \partial_z^2 + 4nz^3 \partial_z + 4n(n-1)z^2 \right] \langle \Theta^n \rangle. \quad (4)$$

В стационарном (или квазистационарном) случае (когда  $\partial_t \langle \Theta^n \rangle$  пренебрежимо) мы получаем однородное дифференциальное уравнение, которое допускает степенное решение  $\langle \Theta^n \rangle \propto z^{\xi_n}$ , где

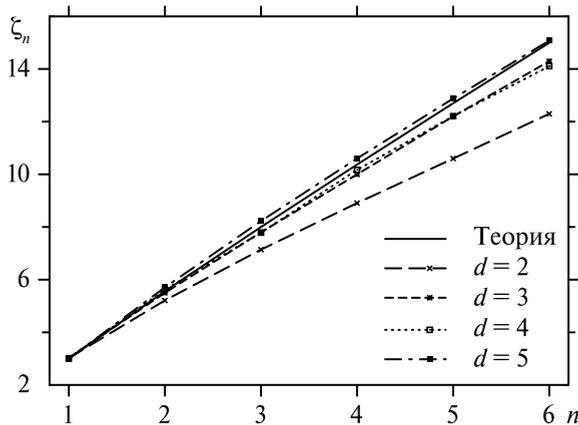
$$\xi_n = 2n - 1/2 + \sqrt{2n + 1/4}. \quad (5)$$

Положительный знак перед корнем выбран для получения строго установленного значения  $\xi_1 = 3$ . В нашем моделировании  $\Theta$  представлялось числом частиц в полосе, параллельной стенке, деленным на ее ширину. Моменты  $\Theta$ ,  $\langle \Theta^n \rangle$  вычислялись в двумерном случае усреднением по долгому времени  $\sim 10^7 \tau$ . Для проверки надежности вычислений были проведены вычисления для различных времен:  $\tau = 0,001; 0,002; 0,004$  — и для четырех различных значений коэффициента диффузии  $\kappa$ . Рисунок 2 демонстрирует совпадение кривых для каждого момента в координатах  $\ln(z/r_{bl})$  и  $\ln(\langle \Theta^n \rangle / C_n)$ , где  $C_n$  — нормировочный коэффициент, примерно равный моменту вблизи стенки. Была также проверена нечувствительность моментов  $\Theta$  к диффузии с выключением в части моделирования диффузии при  $z > 3$ . Было выявлено отсутствие заметного различия между данными. Была также предпринята попытка применить более сложное поле скорости, чем в (3). Вычислялись моменты для поля скорости с четырьмя случайными амплитудами вместо двух, как это сделано в уравнении (3). Результаты показали отсутствие значимого отличия от рис. 2.



**Рис. 2.** Моменты  $\Theta$ ,  $\langle \Theta^n \rangle$  для  $n = 1-6$ . В области  $z > r_{bl}$  результаты сконцентрированы на одной кривой для каждого момента для трех значений  $\tau$  и четырех значений  $\kappa$

Видно, что моменты  $\Theta$  уменьшаются с ростом  $z$  степенным образом вне диффузионного слоя:  $\langle \Theta^n \rangle \propto z^{-\xi_n}$ . После определения степени  $\xi_n$  при  $n = 1-6$  были получены значения, представленные на рис. 3, через нижний ряд точек для лучшего восприятия проведен соединяющий точки пунктир. Мы провели аналогичные вычисления для высших размерностей до  $d = 5$ . Результат представлен на том же рис. 3. Видно, что степени  $\xi_n$  близки между собой при  $d \geq 3$  и близки к теоретическому значению (5). Видно также заметное отклонение численных значений  $\xi_n$  от теоретических (5) в двумерном случае. Это отклонение может быть объяснено большой длиной корреляции пассивного скаляра



**Рис. 3.** Степени моментов  $\langle \Theta^n \rangle$  для  $n = 1-6$  и размерности пространства  $d = 2-5$ . Для сравнения приведена теоретическая кривая  $\xi_n = 2n - 1/2 + \sqrt{2n + 1/4}$

вдоль стенки, причиной чего служит многослойная структура языка типа изображенной на рис. 3. Естественно ожидать, что влияние слоев менее выражено в больших размерностях. Действительно, на рис. 3 видно, что отклонение от значений (5) убывает с ростом размерности пространства. Это подтверждает наше объяснение. Действительно, степени (5) близки к значениям, найденным численно уже в размерности (3).

В любом случае наблюдается аномальный скейлинг, выражающийся в нелинейной зависимости  $\zeta_n$  от  $n$ . Степенное поведение приводит к оценке  $\langle \Theta^n \rangle \sim \Theta_0^n (r_{bl} / z)^{\zeta_n}$ , где  $\Theta_0$  — характерное значение  $\Theta$  внутри диффузионного слоя. Поскольку выпуклость кривой  $\zeta_n$  направлена вверх (см. рис. 3), можно заключить, что высшие моменты много больше их «наивной» оценки как степеней первого момента:  $\langle \Theta^n \rangle \gg \langle \Theta \rangle^n$ . Другими словами, функция распределения моментов имеет медленно спадающие хвосты, отражающие сильную перемежаемость, естественно объясняемую языками.

Мы благодарны И. Колоколову, К. Турицыну, М. Черткову и В. Штайнбергу за многочисленные полезные обсуждения. Численное моделирование проводилось на кластере Парма в Институте теоретической физики им. Ландау РАН.

### Литература

- Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая механика жидкости. М: Наука, 1965.  
 Burgehelea T., Serge E., Steinberg V. // Physical Rev. Letters. 2004. V. 92. P. 164501.  
 Chertkov M., Lebedev V. // Physical Rev. Letters. 2003. V. 90. P. 034501; Physical Rev. Letters. 2003. V. 90. P. 134501.  
 Falkovich G., Gawedzki K., Vergassola M. // Rev. Mod. Phys. 2001. V. 73. P. 913.  
 Friedlander S. K., Keller K. H. // Chemical Eng. Sci. 1963. V. 18. P. 365; Hill J. C. // Annu. Rev. of Fluid Mechanics. 1976. V. 8. P. 135; Chella R., Ottino J. M. // Chemical Eng. Sci. 1984. V. 39. P. 551.  
 Frisch U. Turbulence: the Legacy of A. N. Kolmogorov. N. Y.: Cambridge University Press, 1995.  
 Guoillart E., Kuncio N., Dauchot O., Dubrulle B., Roux S., Thiffeault J.-L. // Physical Rev. Letters. 2007. V. 99. P. 114501.  
 Groisman A., Steinberg V. // Nature. 2000. V. 405. P. 53; Physical Rev. Letters. 2001. V. 86. P. 934; Nature. 2001. V. 410. P. 905.  
 Kantsler V., Steinberg V. // Physical Rev. Letters. 2005. V. 95. P. 258101.  
 Lebedev V. V., Turitsyn K. S. // Phys. Rev. E. 2004. V. 69. P. 036301.  
 Miller R. J., Dasi L. P., Webster D. R. // Experiments in Fluids. 2008. V. 44. P. 719.  
 Ottino J. M. The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos, and Transport. Cambridge, England: Cambridge University Press, 1989.  
 Salman H., Haynes P. H. // Phys. Fluids. 2007. V. 19. P. 067101.  
 Schekochihin A. A., Haynes P. H., Cowley S. C. // Phys. Rev. E. 2004. V. 70. P. 046304.  
 Schumacher J., Sreenivasan K. R. // Phys. Fluids. 2005. V. 17. P. 125107.

*Shraiman B. I., Siggia E. D. // Rev. Nature. L. 2000. V. 405. P. 639.*

*Sreenivasan K. R., Antonia R. A. // Annu. Rev. of Fluid Mechanics. 1997. V. 29. P. 435.*

*Yeung P. K. // Annu. Rev. of Fluid Mechanics. 2002. V. 34. P. 115.*

**PASSIVE SCALAR STRUCTURES IN PERIPHERAL REGIONS  
OF RANDOM FLOWS**

**V. Lebedev<sup>1</sup>, A. Chernykh<sup>2,3</sup>**

<sup>1</sup> *Landau Institute for Theoretical Physics of the Russian Academy of Sciences*

*E-mail: lwlebede@gmail.com*

<sup>2</sup> *Institute of Automation and Electrometry Siberian Branch  
of the Russian Academy of Sciences*

<sup>3</sup> *Novosibirsk State University. E-mail: chernykh@iae.nsk.su*

We investigate statistical properties of the passive scalar near walls in random flows assuming weakness of its diffusion. Then at advanced stages of the passive scalar mixing its unmixed residue is concentrated in a narrow diffusive layer near the wall. We conducted numerical simulations and revealed structures responsible for the passive scalar transport to bulk, they are passive scalar tongues pulled from the diffusive boundary layer. The passive scalar integrated along the wall possesses well pronounced scaling behavior. We propose an analytical scheme giving exponents of the integral passive scalar moments, the exponents agree reasonably with numerics in 3D.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ НАД ПРОИЗВОЛЬНОЙ ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

**А. Г. Славин, К. В. Карельский, А. С. Петросян**

*Институт космических исследований Российской академии наук  
E-mail: achernyshov@iki.rssi.ru; kkarelsk@iki.rssi.ru; apetrosoy@iki.rssi.ru*

В данной работе предложен численный метод для изучения гидродинамических течений тяжелой невязкой жидкости со свободной поверхностью над произвольным профилем дна. Произвольный профиль дна аппроксимируется кусочно-постоянной функцией, разбивающей его на конечное число областей со ступенчатой границей. Для реализации указанного метода использована квазидвухслойная модель течений жидкости над ступенчатой границей с учетом физических процессов вблизи ступеньки. В работе реализовано численное моделирование различных физических явлений, таких как течение жидкости над наклонной подстилающей поверхностью, натекание ударной волны на наклонный берег, падение столба жидкости над подстилающей поверхностью, задаваемой различными способами, течение жидкости над подстилающей поверхностью сложного профиля.

## ВВЕДЕНИЕ

Задача об обтекании сложной границы течениями тяжелой жидкости со свободной поверхностью в присутствии источников является фундаментальной для моделирования крупномасштабных течений атмосферы и океана. Это прежде всего связано с тем, что улучшение разрешения таких моделей делает необходимым учет особенностей рельефа границы и поэтому требует глубокого понимания процессов на малых масштабах и их нетривиального влияния на крупном масштабе. По этой причине разработка приближенных моделей и вычислительных методов, альтернативных решению исходных трехмерных уравнений гидродинамики, является актуальной проблемой. Уравнения мелкой воды (УМВ), основанные на осреднении поля скорости по глубине и пренебрежении вертикальными ускорениями, широко используются для описания таких физических явлений, как приливные волны и течения в океане (*Hendershott*, 1981), распространение волн прорыва и приливных бор в реках (*Stoker*, 1948), распространения волн цунами (*Марчук* и др., 1983), распространения тяжелых газов и примесей в планетных атмосферах (*Dowling, Ingersoll*, 1989), а также для моделирования прибрежных течений (*Wind, Vreugdenhil*, 1986), течений в реках (*Ogink et al.*, 1986) и озерах (*Platzman*, 1972), течений в водозаборниках, технических сужениях и лотках (*Stoker*, 1957), атмосферных движений больших масштабов (*Charney et al.*, 1950; *Gottelmann*, 1999; *Spotz et al.*, 1998). Приближение мелкой воды было разработано для моделирования течений на ровной границе или на наклонной плоскости (*Беликов, Семенов*, 1997; *Karelsky et al.*, 2000). Наличие же препятствий, обусловленных сложной топологией границы, требует

либо решения полных уравнений гидродинамики, либо альтернативных приближений, поскольку классические приближения мелкой воды на однородной границе нарушаются. В данной работе мы обсуждаем возможность, с одной стороны, использовать усреднение по вертикальной координате уравнений Эйлера в приближении мелкой воды, а с другой — учесть накапливающееся влияние вертикальных движений, характерное для гидродинамических течений над произвольной границей.

Обсуждается постановка задачи о нахождении течения тяжелой невязкой жидкости со свободной поверхностью над произвольной границей в рамках приближения мелкой воды, и предлагается новый численный метод ее решения. Произвольная комплексная подстилающая поверхность описывается односвязной поверхностью второго порядка  $F(x, y, x) = 0$ . Для моделирования течений над такой поверхностью существует два принципиально различных случая: во-первых, поверхность задается дифференцируемой функцией пространственных переменных в каждой точке пространства  $z = b(x, y)$  и, во-вторых, существует некоторое ограниченное число точек, в которых задание подстилающей поверхности дифференцируемой функцией в явном виде невозможно. Наиболее общий пример подстилающей поверхности, включающий все характерные типы неоднородностей, приведен ниже.

При численном моделировании таких течений после перехода к конечно-разностным соотношениям профиль произвольной неоднородной поверхности представляется ломаной, состоящей из соответствующей комбинации вертикальных горизонтальных или наклонных отрезков, вершины которых соответствуют узлам сетки. Учет неоднородности границы между узлами осуществляется либо параметризацией диссипации кинетической энергии на границе, либо введением стоковых слагаемых, точно отражающих природу процессов лишь в случае плоской подстилающей поверхности с ограниченным углом наклона. В последнем случае эти слагаемые представляют собой скатывающую силу, действующую на жидкость. Однако непосредственно сами узловые точки, где происходит достаточно резкое изменение рельефа дна, вносят свой вклад лишь опосредованно через влияние дополнительных стоковых слагаемых или изменение значения параметризации в соседних областях от узловой точки.

Строго говоря, численное решение слева и справа от точки, являющейся узлом сетки, определяет два различных течения, соответствующих различным дифференциальным системам уравнений. В малой окрестности этой точки обе аппроксимации исходных уравнений Эйлера не работают, при этом, однако, величина возмущений вблизи такой особенности может быть сопоставима с масштабом изучаемого течения и, следовательно, нарушить аппроксимацию решений исходных уравнений Эйлера. А именно осредненные по глубине решения уравнений Эйлера будут принципиально отличаться от решений осредненных уравнений, т. е. уравнений мелкой воды. Физически данная ситуация обусловлена, с одной стороны, нарушением предположения о гидростатическом распределении давления, с другой — нетривиальной зависимостью горизонтальной скорости от вертикальной координаты.

Существующие методы решения уравнений мелкой воды в случае наличия подстилающей поверхности сложного профиля можно разделить на несколько основных подходов. Распространенным подходом к решению являются методы, представляющие наклонную поверхность дна в виде источников в уравнениях мелкой воды. Впервые данный подход был предложен в работе (Bermudez, Vazquez, 1994), далее эту идею улучшали и видоизменяли в работах (Alcrudo, 1999; Benkhaloun et al., 1999; Hubbard, Garcia-Navarro, 2001; Le Veque, 1998; Zoppou, Roberts, 2000). Однако данный подход не работоспособен в случае наличия участков подстилающих поверхностей с резкими перепадами высот, в частности, для уступов дна, где особенно обостряется проблема, связанная с неоднородностью горизонтальной скорости. Другой подход к решению этой проблемы состоит в замене участков с резким перепадом подстилающей поверхности наклонными плоскостями с большим углом наклона (Hu et al., 2000). Однако такой подход лишь обостряет проблему возмущений, вносимых особенностями аппроксимации поверхности, и игнорирует принципиальные проблемы, обусловленные негидростатичностью давления и зависимостью горизонтальной скорости от вертикальной координаты. В качестве альтернативы используют реконструкцию данных на границе вертикальной ступеньки без учета особенностей решения задачи Римана, вызванных наличием ступеньки (Zhou et al., 2002; Zhou et al., 2001). В рамках приближения мелкой воды не существует однозначного решения вблизи разрыва дна, вследствие чего для выбора единственного решения необходимо вводить дополнительные приближения, отражающие реальную картину течения. Вообще говоря, на единицу удельного перепада высот, начиная с некоторого критического значения, необходимо принимать во внимание величину отклонения горизонтальной скорости от средней, поскольку это отклонение нетривиально отражается уже на самих средних величинах.

Одна из основных трудностей моделирования течений мелкой воды — возможность появления зон частичного или полного обмеления. Зоны частичного обмеления могут появляться в областях течений, где глубина жидкости сопоставима с величиной перепада подстилающей поверхности. В таком случае рассматриваемая область течения может преобразовываться из односвязной в многосвязную или наоборот. Зоны полного обмеления представляют вычислительную сложность для большинства конечно-разностных методов и требуют выделения и специального учета таких зон.

Для преодоления указанных трудностей в данной работе предлагается метод, основанный на аппроксимации произвольной подстилающей поверхности ступенчатой границей. Предлагаемый подход принадлежит к семейству методов, основанных на решении задачи распада произвольного разрыва, и базируется на последовательном решении классических уравнений мелкой воды на ровной плоскости методом Годунова с учетом влияния вертикальной неоднородности течения при расчете потоков через границы ячеек, примыкающих к ступенькам. Учет вертикальной неоднородности обеспечивается использованием решения задачи Римана на ступеньке на основе квазидвухслойной

модели мелкой воды, рассмотренной в работах (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005; Karelsky et al., 2006). Отличительной особенностью данной модели является разделение исследуемого течения на два слоя при расчете потоковых величин вблизи каждой ступеньки с улучшением аппроксимации исходных трехмерных уравнений Эйлера. Однозначность такого разделения на два слоя обеспечивается единственностью решения обратной задачи Дирихле для нахождения этой границы.

Конечно-разностная схема, разработанная на основе квазидвухслойной модели мелкой воды, описана в разд. 1. В разд. 2 приведены результаты решения задачи о распаде столба жидкости на наклонной плоскости, имеющей аналитическое решение. В разд. 3 проведено сравнение предложенного метода с известным численным и точным решением задачи. В разд. 4 представлены результаты численного моделирования течений над заданной комплексной поверхностью, включающей все характерные особенности рельефа дна. В заключении сформулированы основные результаты работы.

## 1. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ УМВ НАД ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ПРОИЗВОЛЬНОГО ПРОФИЛЯ

В данном разделе описана разностная схема для уравнений мелкой воды над подстилающей поверхностью произвольного профиля. Основная идея разработанной разностной схемы состоит в том, чтобы, не нарушая аппроксимации уравнений мелкой воды, учесть влияние эффектов, обусловленных вертикальными градиентами поля скорости, на осредненное по глубине поле. В реальных задачах с большими расчетными областями и сложной структурой дна неизбежно возникают области, в которых приближения мелкой воды, строго говоря, не применимы. Действительно, течения в них становятся существенно трехмерными, усложняясь застойными зонами, зонами возвратных течений. Естественно, подробное описание поведения течений в этих областях возможно лишь при решении уравнений Эйлера, а зачастую и полных уравнений Навье – Стокса. Однако крупномасштабное влияние этих локальных зон на осредненное по глубине поле скорости необходимо учитывать для получения адекватных результатов.

Запишем уравнения Сен-Венана для течений жидкости над неоднородной поверхностью в дивергентном виде для заданного профиля дна (Stoker, 1957):

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial huv}{\partial y} = -gh \frac{db}{dx} \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial hvu}{\partial x} = -gh \frac{db}{dy} \end{cases} \quad (1)$$

В системе уравнений (1):  $g$  — ускорение свободного падения;  $h(x, y, t)$  — глубина жидкости;  $u(x, y, t)$  — осредненная по глубине горизонтальная компонента скорости в направлении  $x$ ;  $v(x, y, t)$  — осредненная по глубине горизонтальная компонента скорости в направлении  $y$ ;  $b(x, y)$  — функция, задающая рельеф дна.

Для построения сетки подстилающая поверхность аппроксимируется кусочно-постоянной функцией, т. е. граница представляется совокупностью горизонтальных и вертикальных участков плоскостей так, что каждая ячейка принадлежит участку подстилающей поверхности с ровным горизонтальным дном. Очевидно, что при таком построении сетки каждая ячейка обладает собственной высотой дна, вообще говоря, различной для каждой ячейки. Данный способ построения сетки может легко автоматизироваться, при условии что выдерживаются ограничения на максимальный перепад высот, допустимый для каждой ячейки, не принадлежащей области скачкообразных изменений профиля подстилающей поверхности. В некоторых задачах полезно затем регуляризовать сетку, измельчая ее до размеров минимальной полученной ячейки или до характерных размеров поставленной задачи. После этого начальные условия задачи представляются сеточной функцией, которая ставит в соответствие каждой ячейке с номером  $(x, y)$  три осредненные по ее площади величины:  $H_{x,y}^0$  — глубину жидкости,  $(V_{x,y}^0, U_{x,y}^0)$  — вектор скорости жидкости и  $B_{x,y}$  — высоту подстилающей поверхности.

В основу разностной схемы положен метод Годунова (Годунов, 1976), использующий интегральную форму уравнений (1) в следующем виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} \iint_S h dx dy + hu dy dt + hv dx dt = 0, \\ \iint_S hu dx dy + (hu^2 + gh^2/2) dy dt + huv dx dt + \iiint_G gh \frac{db}{dx} dx dy dt = 0, \\ \iint_S hv dx dy + (hv^2 + gh^2/2) dx dt + hvu dy dt + \iiint_G gh \frac{db}{dy} dx dy dt = 0, \end{array} \right. \quad (2)$$

где  $G(x, y, t)$  — произвольная ненулевая пространственно-временная область;  $S$  — граница области  $G(x, y, t)$ .

Следует обратить внимание, что применение кусочно-постоянной сетки, очевидно, приведет к исчезновению из разностной схемы (3) слагаемых, отвечающих за изменение геометрии подстилающей поверхности. В дальнейшем будет показано, что использование специальной процедуры расчета значения гидродинамических величин на гранях ячеек, основанной на квазидвухслойной модели течения мелкой воды (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005; Karelsky et al., 2006), позволяет адекватно описать эффекты, обусловленные изменением профиля поверхности. В работе (Беликов, Семенов, 1997) аналогичные слагаемые также были учтены в явном виде при подсчете баланса массы и импульса внутри каждой ячейки, а для определения потоков

через границу ячеек — не явно, посредством перераспределения уровня жидкости в ячейках, в зависимости от угла наклона дна, на каждом временном шаге. Очевидно, что предлагаемый в настоящей работе подход опосредованно приводит к перераспределению уровня жидкости по длине ячейки, но при этом потоковые члены рассчитываются оригинальным способом, что позволяет точнее учитывать эффекты, связанные с взаимодействием подстилающей поверхности и жидкости.

Применим интегральные законы сохранения (2) к каждой ячейке, т. е. выбирая в качестве  $S$  поверхность, определяемую гранью ячейки за временной шаг, и полагая, что на границе ячейки значения всех гидродинамических параметров остаются неизменными на протяжении временного шага интегрирования, получим разностную схему:

$$\begin{aligned}
 H_{x,y}^{t+1} &= H_{x,y}^t + \tau \left( \frac{H_{x-1/2,y}^t U_{x-1/2,y}^t - H_{x+1/2,y}^t U_{x+1/2,y}^t}{X} + \frac{H_{x,y-1/2}^t V_{x,y-1/2}^t - H_{x,y+1/2}^t V_{x,y+1/2}^t}{Y} \right), \\
 U_{x,y}^{t+1} &= \tau \left( \frac{g \left( H_{x-1/2,y}^t + i \times (B_{x-1,y} - B_{x,y}) \right)^2}{2} + H_{x-1/2,y}^t (U_{x-1/2,y}^t)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{g \left( H_{x+1/2,y}^t + i \times (B_{x+1,y} - B_{x,y}) \right)^2}{2} - H_{x+1/2,y}^t (U_{x+1/2,y}^t)^2 \right) + \\
 &\quad \frac{X H_{x,y}^{t+1}}{X H_{x,y}^{t+1}} + \\
 &\quad + \frac{H_{x,y}^t U_{x,y}^t}{H_{x,y}^{t+1}} + \tau \frac{H_{x,y-1/2}^t U_{x,y-1/2}^t V_{x,y-1/2}^t - H_{x,y+1/2}^t U_{x,y+1/2}^t V_{x,y+1/2}^t}{Y H_{x,y}^{t+1}}, \quad (3) \\
 V_{x,y}^{t+1} &= \tau \left( \frac{g \left( H_{x,y-1/2}^t + i \times (B_{x,y-1} - B_{x,y}) \right)^2}{2} + H_{x,y-1/2}^t (U_{x,y-1/2}^t)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{g \left( H_{x,y+1/2}^t + i \times (B_{x,y+1} - B_{x,y}) \right)^2}{2} - H_{x,y+1/2}^t (U_{x,y+1/2}^t)^2 \right) + \\
 &\quad \frac{Y H_{x,y}^{t+1}}{Y H_{x,y}^{t+1}} + \\
 &\quad + \frac{H_{x,y}^t V_{x,y}^t}{H_{x,y}^{t+1}} + \tau \frac{H_{x-1/2,y}^t U_{x-1/2,y}^t V_{x-1/2,y}^t - H_{x+1/2,y}^t U_{x+1/2,y}^t V_{x+1/2,y}^t}{X H_{x,y}^{t+1}},
 \end{aligned}$$

где  $\tau$  — шаг по времени;  $X$  и  $Y$  — шаги по пространству;  $H$  — глубина жидкости;  $U$  — скорость в направлении  $x$ ;  $V$  — скорость в направлении  $y$ . Нижние индексы  $x, y$  — значения функции, отнесенные к центру масс ячейки с номером  $(x, y)$ . Полунижние индексы  $x \pm 1/2, y \pm 1/2$  — значения величин на границе между ячейками с номерами  $x, x \pm 1$  и  $y, y \pm 1$  соответственно. Верхний индекс  $t$  обозначает номер шага по времени;  $B_{x,y}$  — высота дна ячейки с номером  $(x, y)$ .

Каждая заданная грань ячейки расчетной области состоит в общем случае из двух частей: из части, аппроксимирующей подстилающую поверхность,

и оставшейся части, через которую осуществляется свободное течение жидкости. Формально, с точки зрения приближения мелкой воды первая часть отсутствует, хотя для исходных уравнений Эйлера она, фактически являясь подстилающей поверхностью, граница, на которой выполнено условие непротекания. При выводе уравнений мелкой воды граничное условие на ней учитывается в самом уравнении, что, очевидно, не изменяет природу ее взаимодействия с потоком жидкости. Поэтому члены, отвечающие в разностной схеме за взаимодействие подстилающей поверхности и жидкости, имеют вид

$$\frac{g \left( H_{x-1/2,y}^t + i \left( B_{x-1,y} - B_{x,y} \right) \right)^2}{2}, \quad \frac{g \left( H_{x+1/2,y}^t + i \left( B_{x+1,y} - B_{x,y} \right) \right)^2}{2},$$

$$\frac{g \left( H_{x,y-1/2}^t + i \left( B_{x,y-1} - B_{x,y} \right) \right)^2}{2}, \quad \frac{g \left( H_{x,y+1/2}^t + i \left( B_{x,y+1} - B_{x,y} \right) \right)^2}{2}, \quad (4)$$

где слагаемые  $i \left( B_{x\pm 1,y} - B_{x,y} \right)$ ,  $i \left( B_{x,y\pm 1} - B_{x,y} \right)$  описывают «работу» перепада высот над потоком жидкости;  $i$  принимает значение либо 0 в случае отрицательного перепада соответствующих высот  $\left( B_{x\pm 1,y} - B_{x,y} \right)$ ,  $\left( B_{x,y\pm 1} - B_{x,y} \right)$  подстилающей границы, либо  $0 \leq i \leq 1$  в случае положительного перепада. Переменная  $i$  принимает значение, равное единице, в случае если  $H^*$ , определяемое соотношениями, рассмотренными ниже, для соответствующей грани ячейки  $(x, y)$ , не превышает значения глубины внутри нее. В противном случае значение  $i$  на соответствующей грани является отношением глубины, формирующейся при полном торможении потока  $(H_{x,y}^t, U_{x,y}^t, V_{x,y}^t)$  на указанной грани, к соответствующему перепаду высот подстилающей поверхности.

Если перепад высот отсутствует, глубины  $H_{x\pm 1/2,y}^t$ ,  $H_{x,y\pm 1/2}^t$  и скорости  $U_{x\pm 1/2,y}^t$ ,  $V_{x,y\pm 1/2}^t$  жидкости вычисляются решением обычной задачи Римана на ровной плоскости и  $i \left( B_{x\pm 1,y} - B_{x,y} \right)$ ,  $i \left( B_{x,y\pm 1} - B_{x,y} \right)$  принимают нулевые значения, и выражения (4), а вместе с ними и вся разностная схема (3) тождественно переходят в стандартную разностную схему Годунова для классических уравнений мелкой воды над ровным дном.

При наличии перепада высот подстилающей поверхности для определения глубин  $H_{x\pm 1/2,y}^t$ ,  $H_{x,y\pm 1/2}^t$  и скоростей  $U_{x\pm 1/2,y}^t$ ,  $V_{x,y\pm 1/2}^t$  жидкости, протекающей через грань, необходимо решить задачу Римана для ступенчатой границы. Перенос через грань части импульса компланарной грани ячеек, определяемой значением величин  $U_{x,y\pm 1/2}^t$ ,  $V_{x\pm 1/2,y}^t$ , как и обычно, в методах годуновского типа считается чисто конвективным и, следовательно, определяется только направлением течения жидкости через грань ячейки. Интересные аналитические подходы к решению указанной задачи (Остапенко, 2002, 2003; Alcrudo, Benkhaldoun, 2001) не содержат явных выражений для определения потоков через границы ячеек при дискретизации интегральных законов сохранения (2). Кроме того, предположение о наличии стационарной зоны вблизи ступенчатой

границы (Alcrudo, Benkhaldoun, 2001), вводимое по аналогии с решением газодинамической задачи о распаде разрыва начальных условий в сходящемся сопле (Рождественский, Яненко, 1978), приводит к потере некоторых физически осуществимых решений (Alcrudo, Benkhaldoun, 2001), поскольку при таком подходе волны разряжения не могут проходить через уступ. Однако в рамках квазидвухслойной модели течения мелкой воды указанная нефизичность решения исчезает (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005; Karelsky et al., 2006).

Основная идея квазидвухслойной модели (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005; Karelsky et al., 2006) для уравнений мелкой воды состоит в разбиении потока жидкости на два слоя, так что для верхнего слоя влияние ступеньки косвенно, а на нижний слой ступенька влияет непосредственно, напрямую тормозя поток жидкости. Полная глубина жидкости в ячейке слева от полностью затопленной ступеньки разбивается на два слоя: нижний с параметрами потока  $h_1$  и  $u_1$ , для которого ступенька является непротекаемой границей, и верхний с параметрами потока  $h_2$  и  $u_2$ , для которого отсутствует прямое влияние ступеньки. Направим координатную ось  $X$  перпендикулярно грани между ячейками, соответствующей ступеньке, выбирая начало отсчета в точке пересечения оси с гранью ячейки. Сами ячейки полагаются полубесконечными, а скорости  $u_1$  и  $u_2$  — в обоих слоях левой ячейки — совпадающими в начальный момент. Жидкость в правой ячейке при этом считается однослойной, поскольку фактически в правую ячейку попадает только верхний слой левой ячейки. Очевидно, что глубина жидкости в левой от ступеньки ячейке:  $h_1 = h_1 + h_2$ . Осредненные по указанным слоям уравнения Эйлера имеют вид (Vreugdenhil, 1994)

$$\begin{cases} \frac{\partial h_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(h_1 u_1) = 0, \\ \frac{\partial h_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(h_2 u_2) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(h_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x}\left(h_1 u_1^2 + \frac{1}{2} g h_1^2\right) + g h_1 \frac{\partial h_2}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(h_2 u_2) + \frac{\partial}{\partial x}\left(h_2 u_2^2 + \frac{1}{2} g h_2^2\right) + g h_2 \frac{\partial h_1}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (5)$$

где параметры нижнего слоя  $h_1$  и  $u_1$ , а верхнего —  $h_2$  и  $u_2$ . Ступенька полностью тормозит нижний слой:  $u_1 = 0$ , при  $x = 0$ ,  $t \geq 0$ . Условия Коши для системы (5) имеют вид

$$\begin{aligned} h_1 &= h^*, \quad h_2 = h_l - h^*, \quad u_1 = u_l, \quad u_2 = u_l \quad \text{при } x \leq 0, \\ h_2 &= h_r, \quad u_2 = u_r \quad \text{при } x > 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Предположение о том, что формирование волновой картины в нижнем слое происходит много быстрее, чем в верхнем, позволяет разделить поток жидкости на слои так, что нижний слой, взаимодействуя со ступенькой, прихо-

дит в состояние покоя и образует с ней единую горизонтальную плоскость. Тогда возможно пренебречь членом  $gh_1 \frac{\partial h_2}{\partial x}$  в третьем уравнении системы (5) и, выбирая временной шаг так, чтобы верхний слой не успел оказать существенного влияния на нижний, пренебречь членом  $gh_2 \frac{\partial h_1}{\partial x}$ . Следовательно, система (5) распадается на две системы, а переменные  $h_1$  и  $u_1$  вычисляются независимо от переменных  $h_2$  и  $u_2$ . Таким образом, влияние нижнего слоя на верхний будет осуществляться за счет изменения начальных условий (6), в частности условия для  $h_2 = h_l - h^*$  при  $x \leq 0$ , определяемого изменением глубины нижнего слоя при торможении на ступеньке.

В работах (Карельский и др., 2006; Karelsky et al., 2006) установлено, что указанные предположения позволяют адекватно описать формирующееся течение. В результате пара параметров ( $h_1$  и  $u_1$ ) связывается с ( $h_2$  и  $u_2$ ) через начальный параметр  $h^*$ , выбираемый так, что на самой ступеньке высота нижнего слоя совпадает с высотой ступеньки  $h_1|_{x=0} = a, a > 0$ . Для определения значения величин функций на границах ячеек в разностной схеме (3)  $a$  принимается равной соответствующей положительной величине перепада высот ( $B_{x\pm 1,y} - B_{x,y}$ ) или ( $B_{x,y\pm 1} - B_{x,y}$ ) в зависимости от рассматриваемой грани. Для отрицательных перепадов высот необходимо сменить направление координатной оси на противоположное. Таким образом, проблема нахождения значения  $h^*$  сводится к решению обратной задачи Дирихле:

$$\begin{cases} \frac{\partial h_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(h_1 u_1) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(h_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x}\left(h_1 u_1^2 + \frac{1}{2} g h_1^2\right) = 0, \end{cases} \quad (7)$$

$$h_1 = h^* \quad \text{при } x < 0, t = 0,$$

$$u_1 = u_l \quad \text{при } x \leq 0, t = 0,$$

$$u_1 = 0 \quad \text{при } x = 0, t \geq 0,$$

$$h_1 = a \quad \text{при } x = 0, t \geq 0.$$

Решение системы (7) зависит от направления течения жидкости по отношению к ступеньке, т. е. скорости  $u_l$ :

1.  $u_l > 0$ , картина течения имеет вид отраженной влево ударной волны, слева от которой параметры потока  $h^*$  и  $u_l > 0$ , а справа жидкость покоится и ее глубина равна высоте ступеньки, т. е.  $h = a$  и  $u = 0$ , тогда:

$$u_l = (a - h^*) \sqrt{\frac{g}{2} \frac{(a + h^*)}{ah^*}}. \quad (8)$$

Решение определяется непосредственно из алгебраической формулы (8), вытекающей из соотношений Гюгонио на гидравлическом прыжке (Куликовский и др., 2001);

2.  $u_l < 0$ , картина течения имеет вид уходящей влево волны разрежения, слева от которой параметры потока  $h^*$  и  $u_l < 0$ , и справа так же  $h = a$  и  $u = 0$ , следовательно, решение определяется из постоянства соответствующего инварианта Римана, описывающего волну разрежения:

$$h^* = \frac{1}{g} \left( \sqrt{ga} - \frac{1}{2} u_l \right)^2. \quad (9)$$

Выражение (9) в явном виде определяет глубину нижнего слоя, полностью останавливаемого ступенькой.

Найденное значение  $h^*$  позволяет определить значения  $H_{x \pm 1/2, y}^t$ ,  $H_{x, y \pm 1/2}^t$  и скоростей  $U_{x \pm 1/2, y}^t$ ,  $V_{x, y \pm 1/2}^t$  как решение уже классической задачи Римана для мелкой воды над ровным дном с соответствующими начальными условиями.

Условием устойчивости в данном методе будет являться стандартное условие Куранта – Фридрихса, в котором, однако, должна учитываться скорость распространения возмущений, в том числе и в фиктивном нижнем слое. То есть шаг по времени не может превышать минимальное по всем ячейкам время, за которое возмущения проходят половину ячейки, с учетом коррекции на двумерную постановку:

$$\tau = R \frac{\Delta t_x \Delta t_y}{\Delta t_x + \Delta t_y}, \quad (10)$$

где  $\Delta t_x$ ,  $\Delta t_y$  — минимальные времена распространения возмущений по осям абсцисс и ординат соответственно;  $R < 1$  — дополнительный коэффициент для увеличения надежности, в нижеприведенных расчетах принимаемый равным 0,4.

Разработанная разностная схема обеспечивает единообразие построения решения как в областях со сложной геометрией подстилающей поверхности, так и в областях ровного дна, экономичность при работе с большими расчетными областями по пространству, учет диссипации поступательной кинетической энергии у ступеньки и возможность добавления разнообразных стоков, массовых источников, трения. Альтернативный подход для численного моделирования процессов распространения прерывных волн по сухому руслу реализован в работе (Борисова, Остапенко, 2006).

## 2. ПРИМЕРЫ ТЕСТОВЫХ РАСЧЕТОВ НА ОСНОВЕ ПРЕДЛОЖЕННОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ

Для проверки работоспособности квазидвухслойного метода расчета течений над подстилающими поверхностями сложного профиля была решена следующая

шая модельная задача. В центре бесконечной плоскости, расположенной под некоторым углом наклона к горизонту  $k$ , находится столб жидкости, имеющий форму параллелепипеда. Введем систему координат таким образом, чтобы координатные линии  $x = \text{const}$  полностью принадлежали подстилающей поверхности. В момент  $t = 0$  столб воды начинает распадаться. Для получения тестовых расчетов используем хорошо зарекомендовавшую себя, многократно проверенную разностную схему Годунова для двумерных уравнений мелкой воды над ровным дном. Постановка задачи в случае наклонной плоскости отличается лишь дополнительным постоянным членом во втором уравнении системы (1), описывающем закон изменения горизонтальной проекции импульса. Для решения поставленной задачи на базе классической теории мелкой воды достаточно использовать замену переменных, переводящую неоднородную систему Сен-Венана в однородную систему классической мелкой воды (Karelsky et al., 2000). Запишем уравнения Сен-Венана (1) для случая наклонной плоскости в виде

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y} + h \frac{\partial u}{\partial x} + h \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial x} = -gk, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Условия Коши для этой системы (11) в точности соответствуют начальным условиям для однородной системы над ровной плоскостью. Сделаем следующую замену переменных:

$$\begin{cases} \tilde{x} \rightarrow x + \frac{1}{2} gkt^2, \\ \tilde{y} \rightarrow y, \\ \tilde{t} \rightarrow t, \end{cases} \quad (12)$$

т. е.

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} + gk\tilde{t} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}}, \\ \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}}, \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \tilde{y}}. \end{cases} \quad (13)$$

Как показано в работе (Karelsky et al., 2000), преобразование (12, 13) является невырожденным, и после осуществления дополнительной замены

$$\tilde{u} \rightarrow u - gkt \quad (14)$$

зависимой переменной  $u$  система (11) переходит в классическую систему уравнений мелкой воды:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} + v \frac{\partial h}{\partial y} + h \frac{\partial u}{\partial x} + h \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + g \frac{\partial h}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (15)$$

Очевидно, что условия Коши инвариантны относительно замены (12), (14), поскольку при  $t = 0$  данная замена превращается в тождественную подстановку:

$$\begin{cases} \tilde{x} \rightarrow x, \\ \tilde{y} \rightarrow y, \\ \tilde{t} \rightarrow t, \\ \tilde{u} \rightarrow u. \end{cases} \quad (16)$$

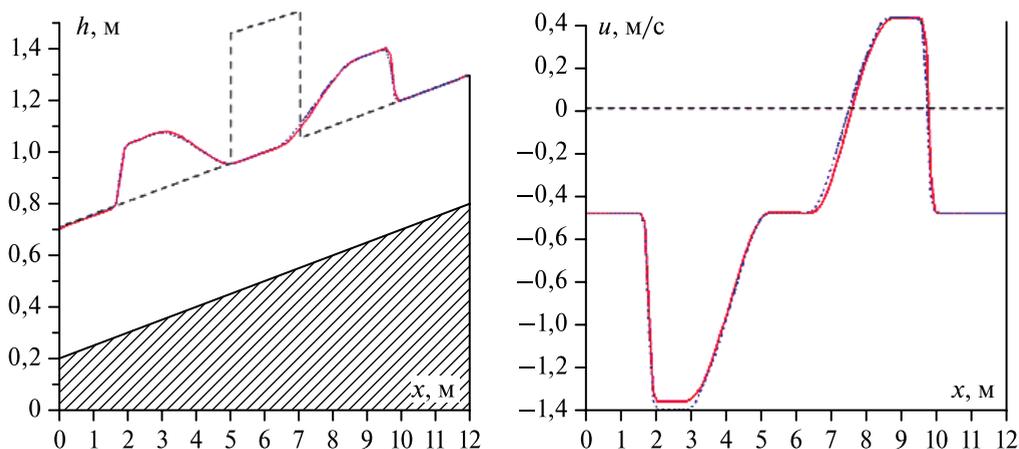
Замена (12), (14) эквивалентна переходу в неинерциальную систему отсчета, движущуюся с постоянным ускорением  $gk$  вдоль оси  $x$ . Если  $k \neq \text{const}$ , то такая замена в общем случае невозможна из-за возникновения дополнительных динамических сил, которые приводят к вырождению якобиана преобразования (12):

$$I = \det \begin{vmatrix} \frac{\partial \tilde{t}}{\partial t} & \frac{\partial \tilde{t}}{\partial x} & \frac{\partial \tilde{t}}{\partial y} \\ \frac{\partial \tilde{x}}{\partial t} & \frac{\partial \tilde{x}}{\partial x} & \frac{\partial \tilde{x}}{\partial y} \\ \frac{\partial \tilde{y}}{\partial t} & \frac{\partial \tilde{y}}{\partial x} & \frac{\partial \tilde{y}}{\partial y} \end{vmatrix} = \det \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ Kt & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1. \quad (17)$$

Таким образом, в случае когда подстилающая поверхность является наклонной плоскостью, переход в соответствующую неинерциальную систему отсчета (т. е. замена координат) позволяет устранить свободный член в системе уравнений Сен-Венана (11) и оперировать с классической системой уравнений мелкой воды (15). Следует подчеркнуть, что для комплексной подстилающей поверхности даже в простейшем случае комбинации наклонной и горизонтальной плоскостей данная замена не работает, поэтому указанный подход можно использовать лишь для осуществления тестовых расчетов.

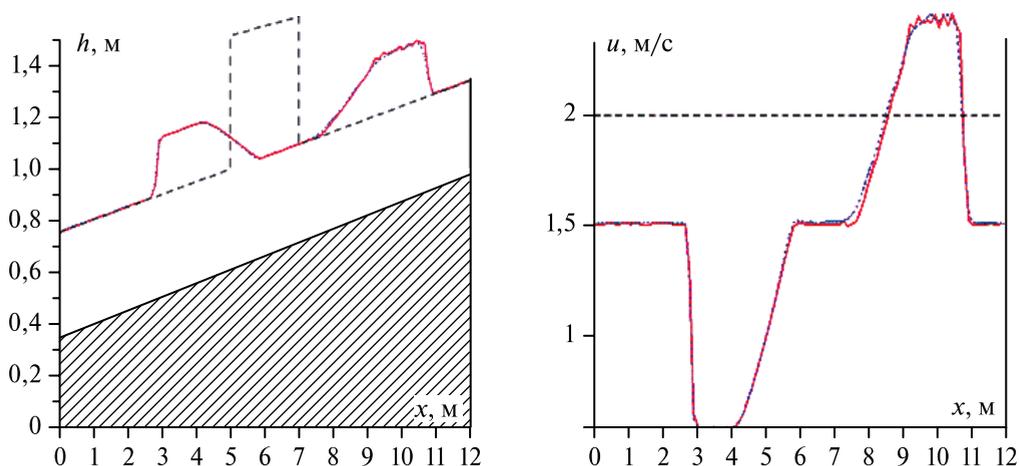
Для проверки предлагаемого метода будем использовать решение задачи о распаде прямоугольного столба жидкости на горизонтальной плоскости с учетом обратной замены координат:

$$\begin{cases} x \rightarrow \tilde{x} - \frac{1}{2} gk\tilde{t}^2, \\ y \rightarrow \tilde{y}, \\ t \rightarrow \tilde{t}, \\ u \rightarrow \tilde{u} + gk\tilde{t}. \end{cases} \quad (18)$$



**Рис. 1.** Глубина и скорость потока жидкости над наклонной поверхностью  $t = 1$  с в сечении плоскостью симметрии  $y = 0$

Аппроксимируем наклонную плоскость системой уступов с постоянным шагом по пространству. Выбранная задача о распаде столба жидкости наиболее показательна для проверки применимости метода, поскольку одновременно сочетает в себе все возможные типы решений. Сравнения проводились для случаев покоящейся жидкости и жидкости, текущей вверх по наклонной плоскости (рис. 1, 2). Были взяты следующие начальные данные: распад разрыва столба жидкости высотой 1 м и квадратным основанием со стороной 2 м над наклонной плоскостью (величина наклона 1:20), покрытой жидкостью. В первом численном эксперименте жидкость покоилась, во втором натекала на плоскость со скоростью 2 м/с. Начальная глубина в обоих экспериментах составляла 0,5 м



**Рис. 2.** Глубина и скорость потока жидкости над наклонной поверхностью с натеканием жидкости,  $t = 1$  с в сечении плоскостью симметрии  $y = 0$

повсюду, вне области, занятой распадающимся столбом жидкости. Начальные параметры потока показаны пунктирной линией. Сплошной (красной) линией на графиках показана глубина и скорость потока, полученные с помощью предложенной гидродинамической модели, поточечной (синей) — с помощью расчета, использующего стандартный метод Годунова для мелкой воды на ровной плоскости с последующей заменой переменных (см. рис. 1, 2).

На представленных графиках (см. рис. 1, 2) выявлена практически полная аналогия между результатами, полученными с помощью представленной модели, и расчетом, использующим замену переменных, что свидетельствует об эффективности применения модели при описании таких физических явлений. Возникающие колебания за фронтом ударных волн находятся внутри погрешности метода и со временем не приводят к нарушению устойчивости.

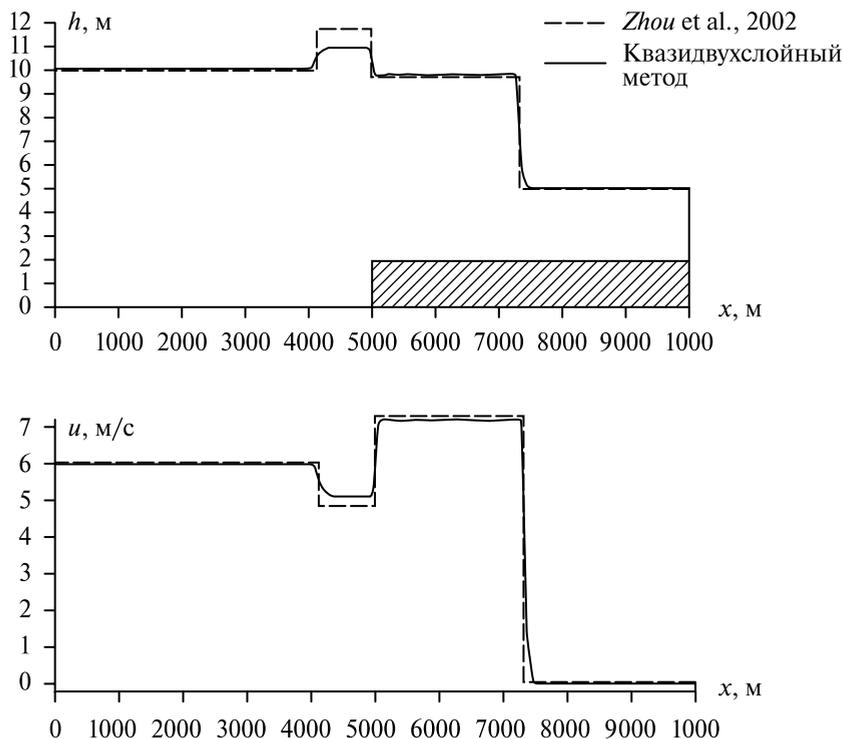
### 3. СРАВНЕНИЕ С ИЗВЕСТНЫМИ ЧИСЛЕННЫМИ И ТОЧНЫМИ РЕШЕНИЯМИ

Численные эксперименты, проведенные в одномерном случае распада произвольного разрыва над ступенькой, продемонстрировали все теоретически возможные картины течения, в том числе и возможные физически, но не описываемые аналитически (решения, включающие прохождение волны разряжения через ступеньку или ее примыкание слева). В этом разделе представлены результаты сравнения полученных решений с известными численными и точными решениями задачи Римана над ступенчатой границей.

На рис. 3 показаны результат решения задачи распада разрыва и его сравнение с методом, использующим замену ступеньки наклонной плоскостью (*Zhou et al.*, 2002). В качестве начальных условий разрыва использовались следующие параметры: слева от ступеньки высота жидкости 10 м, скорость 6 м/с, справа высота 3 м, скорость 0 м/с, высота ступеньки 2 м. Штриховой линией обозначен результат, полученный в работе (*Zhou et al.*, 2002), сплошной линией — результат, полученный квазидвухслойным методом.

Как видно на рис. 3, качественно волновая картина в обоих методах совпадает (левый гидравлический прыжок слева от ступеньки, правый гидравлический — справа от ступеньки). Однако имеются ощутимые отличия в интенсивности левого гидравлического прыжка и особенно в форме его фронта, обусловленные сложностью течения вблизи уступа. Действительно, в решении уравнений Эйлера вблизи уступа присутствует вихревая зона возвратного течения, которая и приводит к искажению фронта гидравлического прыжка и уменьшению его интенсивности за счет появления вертикальных ускорений. Учет данного эффекта особенно важен в случае больших расчетных областей со сложной комплексной подстилающей поверхностью, поскольку взаимодействие возмущений от различных неоднородностей может принципиально менять структуру описываемого течения.

Было также проведено сравнение полученных решений с набором точных решений задачи Римана для уравнений мелкой воды со ступенчатой границей,



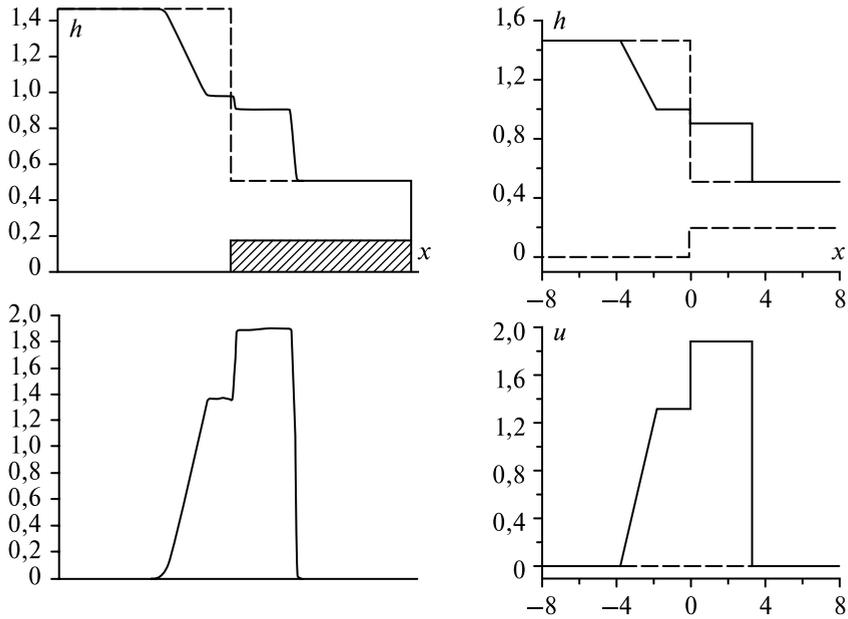
**Рис. 3.** Сравнение расчетов распада произвольного разрыва над ступенчатой границей

представленных в работе (*Bernetti et al., 2007*). Набор решений был получен путем расширения системы уравнений уравнением для подстилающей границы и использованием законов сохранения массы и импульса над ступенчатой границей. Для исключения множественности решений была задана необходимость выполнения следующих условий: диссипация полной энергии через стационарную ударную волну над ступенчатой границей и исключение возможности перехода потока из субкритического в суперкритическое состояние при прохождении ступенчатой границы. Далее представлено несколько графиков сравнения решения, полученного с помощью квазидвухслойной модели, с точным решением, найденным в работе (*Bernetti et al., 2007*).

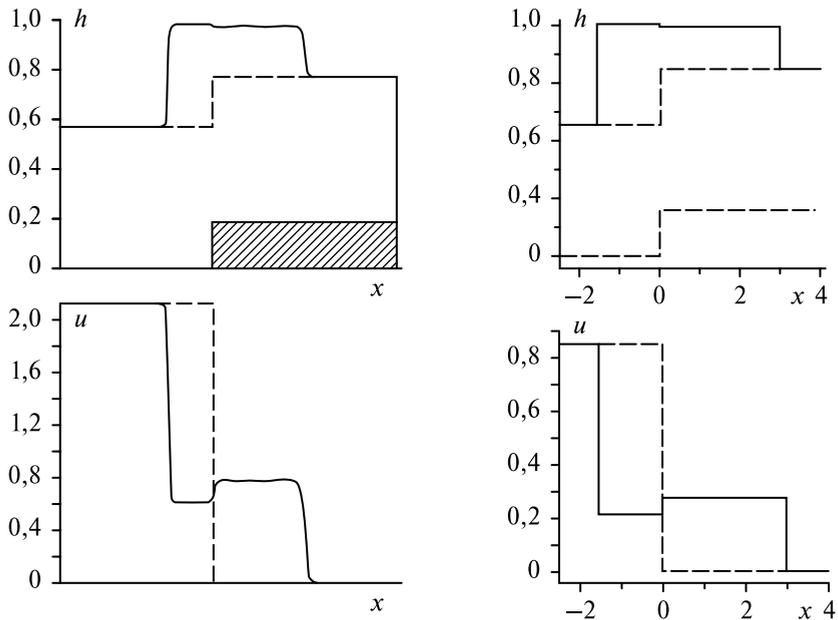
На рис. 4 представлено решение задачи Римана со следующими начальными условиями: слева от ступеньки высота жидкости 1,462 м, число Фруда 0; справа — высота 0,309 м, число Фруда 0, высота ступеньки — 0,2 м.

На рис. 5 представлено решение задачи Римана со следующими начальными условиями: слева от ступеньки высота жидкости 0,569 м, число Фруда 0,9; справа — высота 0,569 м, число Фруда 0, высота ступеньки 0,2 м.

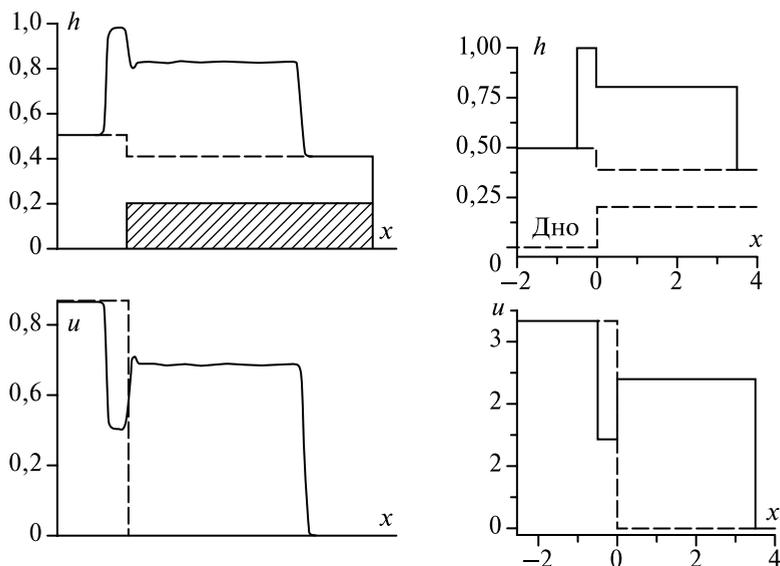
На рис. 6 представлено решение задачи Римана со следующими начальными условиями: слева от ступеньки высота жидкости 0,504 м, число Фруда 1,5; справа — высота 0,190 м, число Фруда 0, высота ступеньки 0,2 м.



**Рис. 4.** Сравнение полученного решения (слева) с точным решением (справа). Решение типа «левая волна разряжения» — слева от ступеньки, «правая ударная волна» — справа от ступеньки



**Рис. 5.** Сравнение полученного решения (слева) с точным решением (справа). Решение типа «левая ударная волна» — слева от ступеньки, «правая ударная волна» — справа от ступеньки



**Рис. 6.** Сравнение полученного решения (слева) с точным решением (справа). Решение типа «левая ударная волна» — слева от ступеньки, «правая ударная волна» — справа от ступеньки, суперкритический поток

Выявлено хорошее совпадение решений, полученных с помощью квазидвухслойной модели, и точных решений, найденных в работе (Bernetti et al., 2007).

#### 4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ЖИДКОСТИ НАД ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ СЛОЖНОГО ПРОФИЛЯ

В данном разделе представлены и проанализированы расчеты движения жидкости над подстилающими поверхностями различного вида. Выше были рассмотрены наклонные поверхности с натеканием или стеканием жидкости. Здесь рассмотрим горизонтальные поверхности с ямой или столбом квадратной формы в центре, а именно моделирование течений на границах с резким перепадом высот, а также поверхности с переходами ровной подстилающей поверхности в наклонную, т. е. моделирование течений на границе, соединяющей два различных течения, соответствующих различным дифференциальным системам уравнений. Данные расчеты описывают весь набор различных особенностей подстилающих поверхностей и позволяют говорить об эффективности применения предложенного метода при описании сложных подстилающих поверхностей, включающих различные комбинации таких особенностей. В конце раздела представлен результат расчета течения жидкости над сложной подстилающей поверхностью, включающей все описанные выше виды и особенности подстилающей поверхности.

На рис. 3–6 представлены результаты расчетов, моделирующих ситуации с резким перепадом высот (наличием ступеньки). Численные эксперименты, с результатами которых можно ознакомиться в работах (Карельский и др., 2006; Славин, 2005; Karelsky et al., 2006), проведенные в одномерном случае распада произвольного разрыва над ступенькой, продемонстрировали все теоретически возможные картины течения, в том числе и возможные физически, но не описываемые аналитически (решения, включающие прохождение волны разряжения через ступеньку).

На рис. 7–10 представлены результаты моделирования течения жидкости при наличии резких перепадов уровня дна в двумерном рассмотрении. На рис. 7, 8 приведено решение задачи о падении столба жидкости над плоской подстилающей поверхностью с углублением квадратной формы в центре расчетной области. Размер расчетной области  $60 \times 60$  м, используется регулярная сетка  $60 \times 60$ . В центре расчетной области углубление глубиной 1 м и размером  $20 \times 20$  м. Начальные условия: глубина жидкости равна 1 м по всему размеру расчетной области, кроме центра, где в момент времени  $t = 0$  расположен столб жидкости высоты 4 м; жидкость покоится во всей расчетной области. На рис. 7 представлены две проекции свободной поверхности жидкости при  $X = \text{const} = 30$  м и  $Y = \text{const} = 30$  м соответственно, иллюстрирующие ожидаемую симметрию решения, определяемую симметричностью начальных и граничных условий и постановкой задачи. На рис. 8 представлена глубина потока жидкости через 3 с.

На рис. 9, 10 представлены результаты моделирования падения столба жидкости высоты 3 м и продольными размерами  $10 \times 10$  м над подстилающей поверхностью, наполненной жидкостью глубиной 2 м с торчащим из дна столбом квадратной формы высотой 3 м и продольными размерами  $10 \times 10$  м. Задача моделирует формирование волн цунами при землетрясениях в океане, когда происходит неожиданное повышение уровня дна под действием тектонических сил. Эволюция падения представлена на рис. 9. Наблюдается образование ударной волны, распространяющейся во всех направлениях.

На рис. 10 представлены проекции свободной поверхности жидкости при  $y = \text{const} = 30$  м.

На рис. 11–14 приведены результаты моделирования течений над границей с переходами ровной подстилающей поверхности в наклонную, а именно моделирование при наличии границы, соединяющей два различных течения, соответствующих различным системам дифференциальных уравнений. На рис. 11 представлены результаты натекания ударной волны на наклонный берег (в природе данная ситуация аналогична натеканию волны цунами на прибрежную зону), аппроксимируемый ступеньками (количество ступенек равно 100, величина наклона 1:6,66). Высота натекающей волны равна 1 м, скорость 2 м/с. Эволюция волновой картины и скорости на береговой линии показана с интервалом в 2 с.

При прохождении ударной волны через наклонный берег наблюдается большое увеличение ее интенсивности и значительное увеличение скорости.

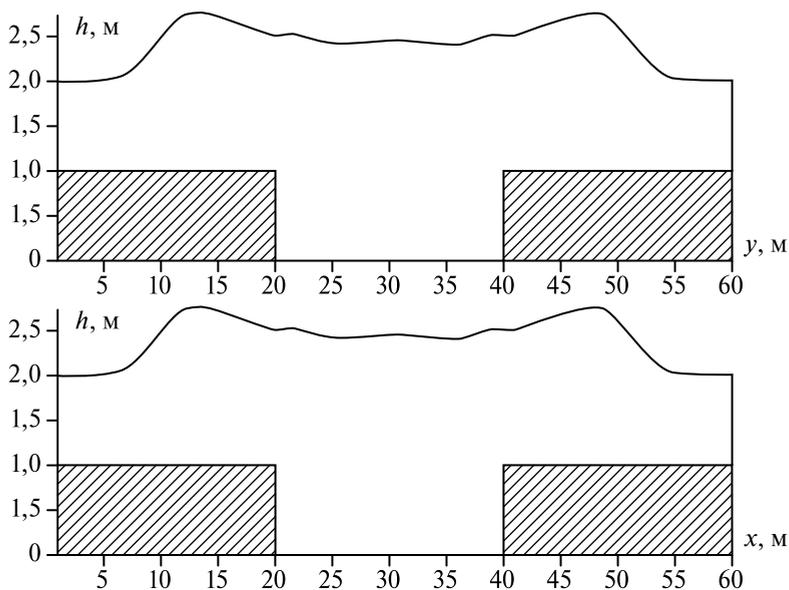


Рис. 7. Проекция свободной поверхности жидкости

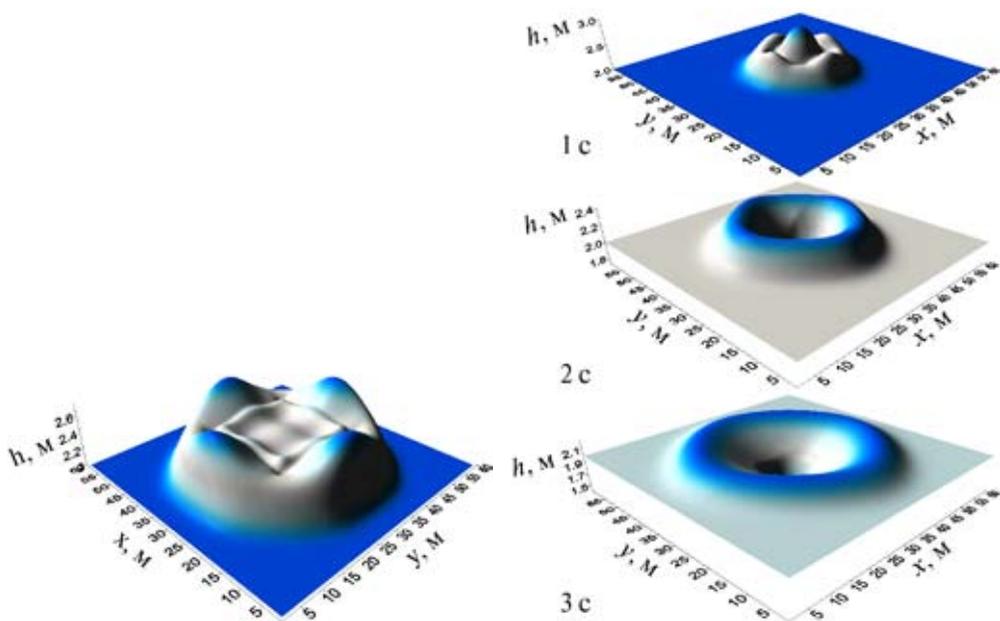
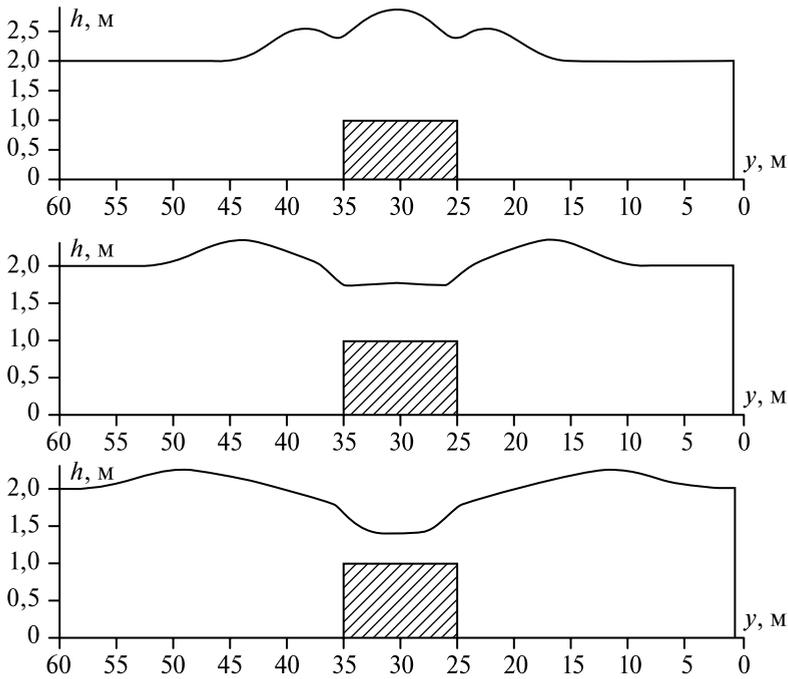
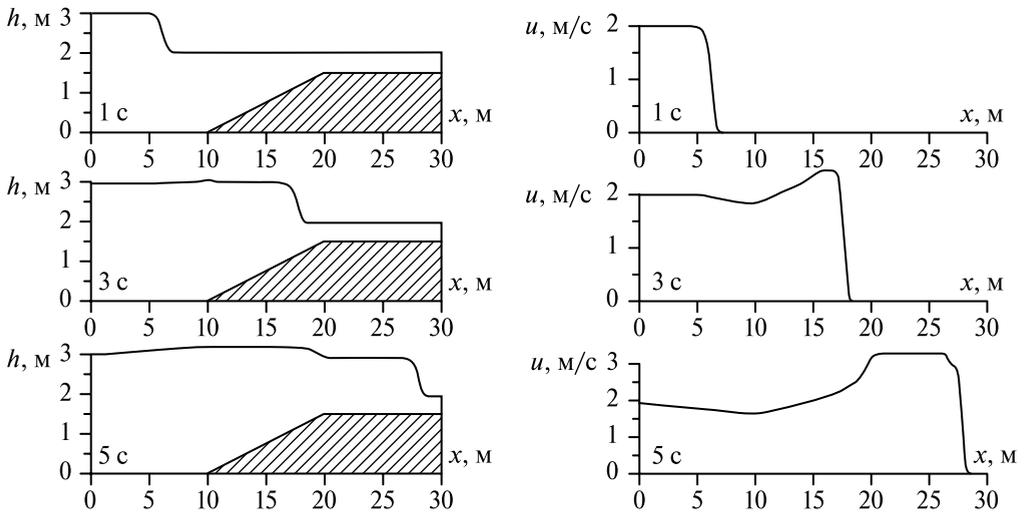


Рис. 8. Глубина потока жидкости  $t = 3$  с

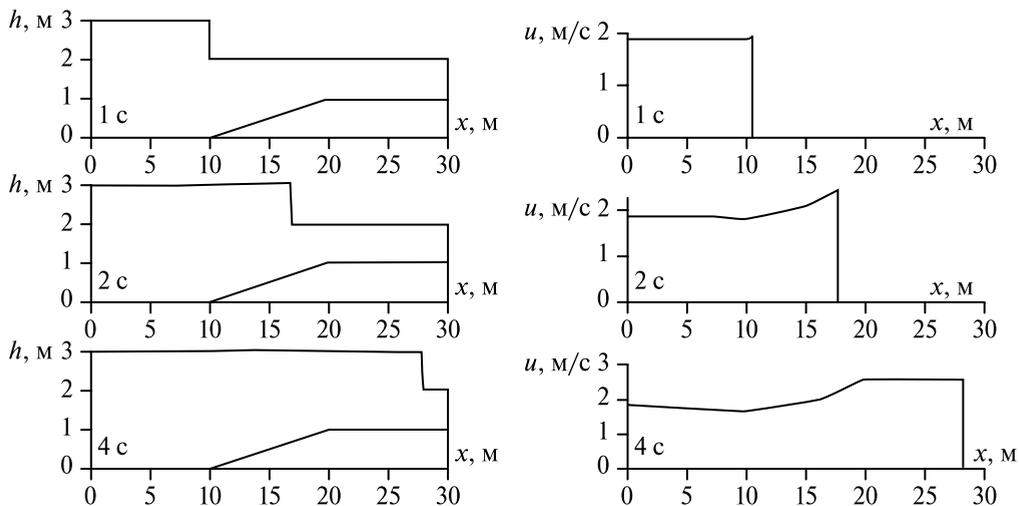
Рис. 9. Эволюция падения столба жидкости над подстилающей поверхностью, наполненной жидкостью с выступающим из дна столбом квадратной формы



**Рис. 10.** Эволюция падения столба жидкости над подстилающей поверхностью, наполненной жидкостью с выступающим из дна столбом квадратной формы (проекция свободной поверхности жидкости при  $y = \text{const} = 30$  м)



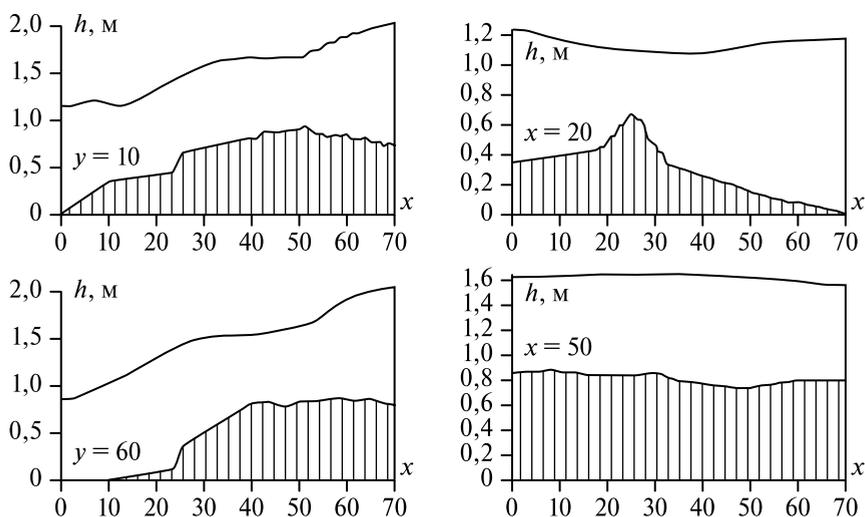
**Рис. 11.** Эволюция натекания ударной волны на наклонный берег, аппроксимируемый ступеньками



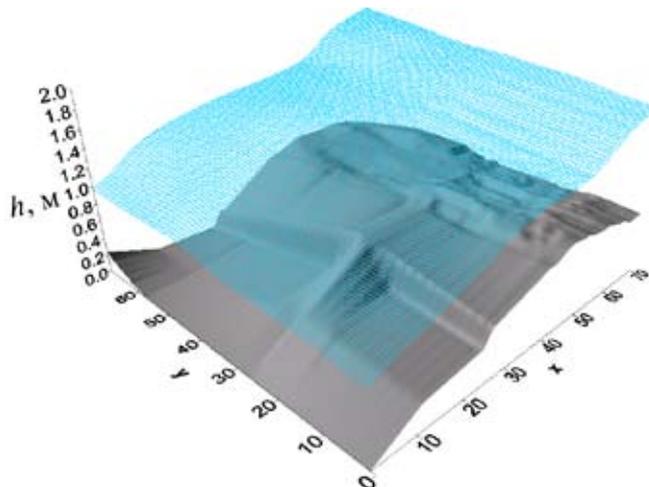
**Рис. 12.** Эволюция натекания ударной волны на наклонный берег, представленная в работе (Toro, 1992)

Для сравнения представлены результаты (рис. 12), полученные в работе (Toro, 1992). Наблюдается хорошее совпадение волновой картины в обоих методах.

Рассмотрим течение жидкости над сложной подстилающей поверхностью, включающей все описанные выше особенности подстилающих поверхностей. Для расчетной области  $20 \times 20$  м была использована регулярная сетка размером  $70 \times 70$  ячеек (4900 ячеек). Начальные параметры потока жидкости: глубина потока во всей расчетной области 1 м, скорость течения в направлении  $x$  — 1 м/с,



**Рис. 13.** Проекция подстилающей поверхности и свободной поверхности жидкости



**Рис. 14.** Поток жидкости над неоднородной подстилающей поверхностью в момент времени 2 с

в направлении  $y - 0$  м/с. Граничные условия: протекание через грани  $x = 0$ ,  $x = 70$ , не протекание через грани  $y = 0$ ,  $y = 70$ . Таким образом моделируется протекание жидкости над неоднородной подстилающей поверхностью между двух граней. На рис. 13 представлены четыре проекции подстилающей поверхности и свободной поверхности жидкости при  $y = \text{const} = 10, 60$  и  $x = \text{const} = 20, 50$  в момент времени 2 с, иллюстрирующие сложный профиль подстилающей поверхности, включающий весь набор рассмотренных выше особенностей.

Поток жидкости в момент времени 2 с в изометрии представлен на рис. 14.

### Заключение

В данной работе предложен вычислительный метод для моделирования течений тяжелой жидкости со свободной поверхностью над границей произвольной формы. Метод основан на представлении произвольной границы ступенчатой поверхностью и использовании традиционного метода Годунова в областях однородной горизонтальной поверхности и специальных расчетов потоковых величин в областях, примыкающих к вертикальным особенностям рельефа дна. Расчет соответствующих потоков ведется на основе квазидвухслойной модели мелкой воды, являющейся уточнением классической однослойной модели по отношению к исходной системе уравнений Эйлера. Предложенный численный метод позволяет вести расчет гидродинамических течений тяжелой невязкой жидкости со свободной поверхностью над произвольным профилем дна. Метод обеспечивает единообразие построения решения как в областях со сложной геометрией подстилающей поверхности, так и в областях ровного дна, экономичность при работе с большими расчетными областями по пространству, учет диссипации поступательной кинетической энергии у ступеньки и воз-

возможность добавления разнообразных стоков, массовых источников, трения. Работоспособность метода была проверена на основе решений нескольких классов гидродинамических задач, определяемых особенностями подстилающих поверхностей и описывающих различные физические явления. Показано соответствие численных результатов решения задачи над наклонной плоскостью, аппроксимируемой множеством ступенек, результатам расчета, использующего точного решения стандартной задачи Римана с последующей заменой переменных.

### Литература

- Беликов В. В., Семенов А. Ю.* Численный метод распада разрыва для решения уравнений теории мелкой воды // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1997. Т. 37. № 8. С. 1006–1019.
- Борисова Н. М., Остапенко В. В.* О численном моделировании процесса распространения прерывных волн по сухому руслу // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2006. Т. 46. № 7. С. 1322–1344.
- Годунов С. К.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
- Карельский К. В., Петросян А. С., Славин А. Г.* Численное моделирование гидродинамических течений над произвольным профилем дна в рамках приближения квазидвухслойной мелкой воды: Препринт. Пр-2115. М.: ИКИ РАН. М., 2006.
- Карельский К. В., Петросян А. С., Славин А. Г.* Трансформация разрыва для потоков мелкой воды на скачке // Сб. тр. Международ. конф. МСС-04 «Трансформация волн, когерентные структуры и турбулентность». М., 2004. С. 111–116.
- Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.
- Марчук А. Г., Чубаров Л. Б., Шокин Ю. И.* Численное моделирование цунами. Новосибирск: Наука, 1983.
- Остапенко В. В.* О разрывных решениях уравнений мелкой воды над уступом дна // Прикладная механика и технич. физика. 2002. Т. 43. № 6. С. 62–74.
- Остапенко В. В.* Течения, возникающие при разрушении плотины над ступенькой дна // ПМТФ. 2003. Т. 44 № 4. С. 51–63.
- Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н.* Системы квазилинейных уравнений. М.: Наука, 1978.
- Славин А. Г.* Квазидвухслойная модель для потоков мелкой воды над ступенькой // Тр. 27-й Конф. молодых ученых мех.-мат. ф-та МГУ им. М. В. Ломоносова. М., 2005. С. 110–116.
- Славин А. Г., Карельский К. В., Петросян А. С.* Квазидвухслойная модель для потоков мелкой воды над ступенчатой границей // Тр. 47-й Науч. конф. МФТИ. Ч. 8. Физика и энергетика. М., 2004. С. 30–32.

- Alcrudo F.* Dam-break flow simulation with structured grid algorithms // Proc. CADAM meeting. 1999. P. 47–62.
- Alcrudo F., Benkhaldoun F.* Exact solutions to the Riemann problem of the shallow water equations with a bottom step // Computers and Fluids. 2001. V. 30. P. 643–671.
- Benkhaldoun F., Monthe L., Elmahi I.* A splitting finite volume roe scheme for shallow water equations with source terms // Proc. CADAM meeting. 1999. P. 63–88.
- Bermudez A., Vazquez M. E.* Upwind methods for hyperbolic conservation laws with source terms // Computers and Fluids. 1994. V. 23. P. 1049–1071.
- Bernetti R., Titarev V. A., Toro E. F.* Exact solution of the Riemann problem for the shallow water equations with discontinuous bottom geometry // J. Computational Physics. 2007. doi: 10.1016/j.jcp.2007.11.033.
- Charney J. G., Fjortoft R., Neumann J. von.* Numerical integration of the barotropic vorticity equation // Tellus. 1950. V. 2. P. 237–254.
- Dowling T. E., Ingersoll A. P.* Jupiter's Great Red Spot as a shallow-water system // Atmosph. Sci. 1989. V. 46. Nr. 21. P. 3256–3278.
- Gottelmann J.* A spline collocation scheme for the spherical shallow water equations // J. Computational Physics. 1999. V. 148. Nr. 1. P. 291–298.
- Hendershott M. C.* Long waves and ocean tides. Ch. 10 // Evolution of physical oceanography / Eds. B. A. Warren, C. Wunsch. MIT Press, 1981. P. 292–341.
- Hu K., Mingham C. G., Causon D. M.* Numerical simulation of wave overtopping of coastal structures using the non-linear shallow water equations // Coastal Engineering. 2000. V. 41. P. 433–465.
- Hubbard M. E., Garcia-Navarro P.* Flux difference splitting and the balancing of source terms and flux gradients // J. Computational Physics. 2001. V. 165. P. 89–125.
- Karelsky K. V., Papkov V. V., Petrosyan A. S.* The initial discontinuity decay problem for shallow water equations on slopes // Phys. Let. A. 2000. V. 271. P. 349–357.
- Karelsky K. V., Petrosyan A. S., Slavin A. G.* Quazi-two-layer model for numerical analysis shallow water flows on step // Russian journal of Numerical Analysis and Mathematical modeling. 2006. V. 21. Nr. 6. P. 539–559.
- Le Veque R. J.* Balancing source terms and flux gradients in high-resolution Godunov methods: the quasi-steady wave-propagation algorithm // J. Computational Physics. 1998. V. 146. P. 346–365.
- Ogink H. J. M., Grijsen J. G., Wijbenga A. J. H.* Aspects of flood level computations // Intern. Symp. Flood Frequency and Risk Analysis, Baton Rouge, USA, 1986 (also Delft Hydraulics Comm. 357).
- Platzman G. W.* Two-dimensional free oscillations in natural basins // J. Phys. Oceanogr. 1972. V. 2. Nr. 2. P. 117–138.
- Spotz W. F., Taylor M. A., Swarztrauber P. N.* Fast shallow-water equation solvers in latitude-longitude coordinates // J. Computational Physics. 1998. V. 145. Nr. 1. P. 432–444.
- Stoker J. J.* The formation of breakers and bores // Comm. Pure Appl. Math. 1948. Nr. 1. P. 1–87.
- Stoker J. J.* Water Waves: The Mathematical Theory with Applications. N. Y.: Interscience, 1957.

- Toro E. F.* Riemann problems and the WAF method for solving the two-dimensional shallow water equations // *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A.* 1992. V. 338. P. 43–68.
- Vreugdenhil C. B.* Numerical methods for shallow-water flow. Dordrecht: Kluwer. 1994.
- Wind H. G., Vreugdenhil C. B.* Rip-current generation near structures // *J. Fluid Mechanics.* 1986. V. 171. P. 459–476.
- Zhou J. G., Causon D. M., Ingram D. M., Mingham C. G.* Numerical solutions of the shallow water equations with discontinuous bed topography // *Intern. J. Numer. Meth. Fluids.* 2002. V. 38. P. 769–788.
- Zhou J. G., Causon D. M., Mingham C. G., Ingram D. M.* The surface gradient method for the treatment of source terms in the shallow water equations // *J. Computational Physics.* 2001. V. 168. P. 1–25.
- Zoppou C., Roberts S.* Numerical solution of the two-dimensional unsteady dam break // *Appl. Math. Model.* 2000. V. 24. P. 457–475.

## **SIMULATION OF SHALLOW WATER FLOWS OVER A BED SURFACE WITH AN ARBITRARY PROFILE**

**A. G. Slavin, K. V. Karelsky, A. S. Petrosyan**

*Space Research Institute of the Russian Academy of Science*

A numerical method is proposed in this paper for studying hydrodynamic flows of heavy nonviscous fluid with a free surface over an arbitrary bed profile. This arbitrary bed profile is approximated by a piecewise-linear function splitting it into a finite number of domains with a step boundary. In order to implement this method, a quasi-two-layer model of fluid flow over a step boundary is used taking into account physical processes near the step. In this paper we implement numerical modelling of various physical phenomena, such as fluid flow over a sloping bed surface, shock wave creeping on a sloping bank, a fluid column fall over a bed surface given in various ways, fluid flow over a bed surface of a complex profile.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ МЕЛКОЙ ВОДЫ

**К. В. Карельский, А. С. Петросян, А. Г. Славин**

*Институт космических исследований Российской академии наук.*

*E-mail: achernyshov@iki.rssi.ru; kkarelsk@iki.rssi.ru; apetrosoy@iki.rssi.ru*

В данной работе предложено конечно-разностное представление, описывающее силу Кориолиса в численных методах годовиковского типа для течений вращающейся мелкой воды. Предложены конечно-разностные схемы для моделирования течений как на ровной подстилающей поверхности, так и для подстилающей поверхности произвольного профиля. Влияние силы Кориолиса моделируется введением фиктивной нестационарной границы. Для численной аппроксимации источниковых слагаемых вследствие неоднородности подстилающей поверхности и влияния силы Кориолиса применена квазидвухслойная модель течения жидкости над ступенчатой границей, учитывающая гидродинамические особенности. Осуществлен сравнительный анализ с известными конечно-разностными схемами, описывающими вращение и неоднородность профиля дна, и выполнены расчеты, показывающие эффективность предложенного метода.

### Введение

Помимо задач с источником в виде неоднородной подстилающей поверхности в природе существует большое количество задач с дополнительным внешним источником, в частности задачи исследования вращающейся мелкой воды. Для изучения течений жидкости в присутствии внешних источников разработаны и успешно применяются приближения мелкой воды. Уравнения мелкой воды в случае присутствия внешних источников в силу своей нелинейности оказались достаточно сложными для получения общих аналитических решений (*Вольцингер, Пясковский, 1977; Kirwan-Jr, Juping, 1988; Kirwan-Jr, Mied, 1997; Kizner et al., 2007*), однако успешно интегрируются численно (*Крукуер, Муратова, 2001; Bouchut et al., 2004; Stoker, 1957; Vreugdenhil, 1994*).

Основная сложность численного интегрирования системы уравнений мелкой воды состоит в ее недивергентности, определяемой неоднородностью правой части уравнений сохранения импульса. Присутствие недивергентного слагаемого с физической точки зрения индуцирует сильно нелинейные эффекты, обусловленные скачкообразным изменением гидродинамических величин в областях его резкого изменения. При изучении мелкомасштабных природных течений в приближении мелкой воды, где влияние силы Кориолиса несущественно, разработаны и эффективно применяются численные методы, первоначально созданные для решения уравнений газовой динамики, так как уравнения мелкой воды для горизонтального дна аналогичны течениям баротропного газа с показателем адиабаты, равным двум. Проблема численного интегриро-

вания уравнений мелкой воды при наличии неоднородности подстилающей поверхности (уравнений Сен-Венана) с определенными оговорками сводится к схожей проблеме течения газа в сходящем сопле (*Chapman, Cowling, 1952*).

При численном интегрировании гиперболической системы балансовых уравнений ключевой задачей является получение конечно-разностных схем, удовлетворяющих сохранению устойчивых состояний, таких как, например, равновесие покоящейся воды. Схемы, удовлетворяющие таким свойствам, называют *well-balanced-схемами*. В работе (*Bermudez, Vazquez, 1994*) для выполнения условий сохранения устойчивых состояний было предложено использовать модифицированную схему *Roe* (*Roe, 1981*). Дальнейшее развитие идеи этой работы получило в статьях (*Pares, Castro, 2004; Vazquez-Cendon, 1999*), в работах (*Cea et al., 2007; Cea et al., 2004*) рассмотрены явления турбулентности и массовые источники в задачах, включающих неоднородную топографию, в статьях (*Castro et al., 2006; Castro et al., 2004*) применена улучшающая реконструкция. В работах (*Le Veque, 1998a, b*) было предложено использовать либо точные, либо модернизированные схемы *гудуновского типа* (*Riemann-solvers*). Такой подход хорошо себя зарекомендовал, и данная идея получила широкое развитие для решения задач с источниковыми членами различного происхождения. В частности, в работах (*Беликов, Семенов, 1997; Куликовский и др., 2001*) предложен метод, компенсирующий влияние подстилающей поверхности изменением значений глубин жидкости. В работах (*Audusse, Bristeau, 2005; Bouchut et al., 2004; Pedlosky, 2003*) предложен метод, использующий схему гидростатической реконструкции подсчета потоков на гранях ячеек. С помощью этой схемы промоделированы явления, обусловленные наличием силы Кориолиса, в частности геострафическая адаптация. Изучению этих же явлений посвящена работа (*Kuo, Polvani, 1997*), в которой применен метод Левека (*Le Veque, 1998a, b*). Распространение волн цунами и процессы затопления изучены в работах (*George, 2007, 2006*). В работе (*Zhou et al., 2001*) был предложен метод поверхностных градиентов — способ интерпретации источниковых членов в уравнениях мелкой воды, основанный на точной реконструкции консервативных переменных на гранях ячеек. Метод разделения потоковых величин, который, когда это необходимо, поддерживает точный баланс между градиентами потока и источниковыми членами, представлен в работе (*Hubbard, Garcia-Navarro, 2001*)]. В работе (*Vignoli et al., 2007*) предложена нелинейная реконструкция параметров, обеспечивающая высокий порядок точности разностной схемы для уравнений мелкой воды. Точные частные решения задачи, включающей ступенчатую границу на дне, представлены в работах (*Alcrudo, Benkhaldoun, 2001*). Точные частные решения для задачи, включающей неоднородную топографию, представлены в работе (*Bernetti et al., 2007*). Также следует отметить работы (*Alcrudo, Garcia-Navarro, 1993; Audusse, Bristeau, 2005; Benkhaldoun et al., 2007; Caleffi et al., 2006; Gallouet et al., 2003; Gosse, 2000; Greenberg, Leroux, 1996; Guinot, 2005; Hu et al., 2000; Toro, 1999; Zoppou, Roberts, 2000*), внесшие существенный вклад в решение задач моделирования потоков жидкости над неоднородной поверхностью с источниковыми членами различного происхождения.

Данная работа посвящена разработке численного метода моделирования течений вращающейся мелкой воды, основанного на идее представления силы Кориолиса фиктивной нестационарной границей. Это создает важные преимущества для моделирования таких течений на неровной границе, сводя задачу к моделированию течений мелкой воды над нестационарной эффективной поверхностью. Особое внимание в данной работе уделяется проблемам, которые возникают при дискретизации фиктивной нестационарной границы, описывающей вращение, и путям преодоления этих проблем.

Возможность моделирования вращающейся мелкой воды введением фиктивной нестационарной границы давно используется для построения численных моделей в геофизической гидродинамике (*Bouchut et al.*, 2004; *Kuo, Polvani*, 1997; *Le Veque*, 1998a, b; *Reznik et al.*, 2001). Плодотворность заимствования методов, разработанных для комплексных подстилающих поверхностей, при решении задач с силой Кориолиса, по-видимому, ни у кого не вызывает сомнения. Однако влияние орографии, очевидно, напрямую приводит к существованию «работы» подстилающей поверхности над потоком жидкости, в то время как сама по себе сила Кориолиса «работы» совершать не может. В данной работе обсуждается физическая интерпретация указанного формального заимствования и анализируются границы применимости данного подхода в общем для расщепляющихся разностных схем. Главная проблема при построении расщепляющейся разностной схемы состоит в необходимости постановки и решения одномерной задачи, не имеющей физического эквивалента для конечных временных интервалов. К сожалению, наиболее очевидный путь пренебрежения одной из пространственных координат не решает полностью проблемы. Действительно, отказ от одной из пространственных переменных при решении существенно двумерной задачи приводит к нарушению закона сохранения импульса, что, в свою очередь, приводит к необходимости введения некоторой фиктивной работы для компенсации указанных нарушений, несмотря на всю нефизичность такой компенсации.

Метод, предлагаемый в данной работе, не позволяет полностью обойти указанные трудности, однако используемое квазидвухслойное представление дает возможность точнее определить структуру течения внутри рассматриваемой пространственно-временной области для глубины и одной из составляющих вектора скорости. Это позволяет в предположении стационарности пересчитать трансверсальную скорость и тем самым минимизировать паразитные явления, математически обусловленные отказом от интегрирования уравнения для трансверсальной составляющей вектора скорости, что с физической точки зрения индуцирует нескомпенсированную работу силы Кориолиса внутри потока.

В данной работе для расчета течений мелкой воды над произвольной поверхностью в присутствии силы Кориолиса предлагается модернизированный метод Годунова, адаптирующийся к параметрам потока. Предлагаемый подход принадлежит к семейству методов, основанных на решении задачи распада произвольного разрыва, и базируется на последовательном решении классиче-

ских уравнений мелкой воды на ровной плоскости методом Годунова с учетом влияния вертикальной неоднородности течения при расчете потоков через границы ячеек, примыкающих к ступенчатым границам. Учет вертикальной неоднородности обеспечивается использованием решения задачи Римана на ступеньке на основе квазидвухслойной модели мелкой воды, описанной в работах (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2004, 2005а, б; Славин и др., 2005; 2006, 2008а, б; Karelsky et al., 2006, 2007а; Karelsky et al., 2007, 2005). Отличительной особенностью квазидвухслойной модели является разделение исследуемого течения на два слоя при расчете потоковых величин вблизи каждой ступеньки с улучшением аппроксимации исходных трехмерных уравнений Эйлера. Однозначность такого разделения на два слоя обеспечивается единственностью решения обратной задачи Дирихле для нахождения этой границы. Адаптируясь к параметрам потока, метод позволяет учитывать особенности течения жидкости в каждой точке пространства и в каждый момент времени.

Кроме того, разработанный численный алгоритм был обобщен на случай произвольной внешней силы, которая также может быть представлена фиктивной подстилающей границей. Было проведено численное моделирование задачи о разрушении двумерной дамбы и сравнение полученных решений с результатами имеющихся лабораторных экспериментов.

Уравнения вращающейся мелкой воды приведены в разд. 1. В разд. 2 описано представление силы Кориолиса в методах годуновского типа на основе квазидвухслойной модели. Метод Годунова для уравнений вращающейся мелкой воды над ровной подстилающей поверхностью с применением квазидвухслойного метода представлен в разд. 3. В разд. 4 приведено сравнение предложенного алгоритма с известными методами типа well-balance. Повышение порядка точности метода и результаты численного моделирования приведены в разд. 5. В разд. 6 описан метод Годунова для уравнений вращающейся мелкой воды над подстилающей поверхностью произвольного профиля в рамках квазидвухслойного приближения. Результаты исследования течений мелкой воды над произвольным профилем дна в присутствии внешней силы приведены в разд. 7. В заключении сформулированы основные результаты работы.

## 1. УРАВНЕНИЯ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ МЕЛКОЙ ВОДЫ

Введем декартову систему координат, направляя ось  $z$  коллинеарно и противоположно по направлению к вектору силы тяжести (рис. 1). Учитывая предположения геофизичности и геострофичности течения,

$$\frac{\partial}{\partial t} \leq u \nabla, M = \frac{U}{c} \ll 1, Ro = \frac{U}{2\Omega L} \ll 1, \frac{\Omega^2 L}{g} \ll 1, \quad (1)$$

где  $M$  — число Маха;  $Ro$  — число Россби–Кибеля;  $U$  — характерная скорость;  $L$  — характерный масштаб течения;  $c$  — скорость звука, запишем редуцированную систему уравнений Эйлера в виде системы уравнений «мелкой воды» (Должанский, 2006; Обухов, 1949; Charney et al., 1950; Pedlosky, 2003):

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial huv}{\partial y} = -gh \frac{db}{dx} + fvh, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial hvu}{\partial x} = -gh \frac{db}{dy} - fuh, \end{cases} \quad (2)$$

где  $g$  — ускорение свободного падения;  $h(x, y, t)$  — глубина жидкости или газа;  $u(x, y, t)$  — осредненная по глубине горизонтальная компонента скорости в направлении  $x$ ;  $v(x, y, t)$  — осредненная по глубине горизонтальная компонента скорости в направлении  $y$ ;  $b(x, y)$  — функция, задающая рельеф дна;  $f = 2\Omega \sin\varphi$  — параметр Кориолиса, где  $\Omega = 7,292 \cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$  — частота вращения Земли;  $\varphi$  — широта. Первое уравнение в системе (2) является законом сохранения массы, второе и третье — законами сохранения импульса для соответствующих компонент вектора скорости.

Данная работа посвящена решению класса задач, характерный размер которых таков, что кривизна поверхности пренебрежимо мала и не оказывает значительного влияния. Однако частично эффект кривизны земной поверхности принимается во внимание учетом изменения с широтой параметра Кориолиса  $f$ . Введенное Россби (*Rossby*, 1938)  $\beta$ -приближение предполагает, что

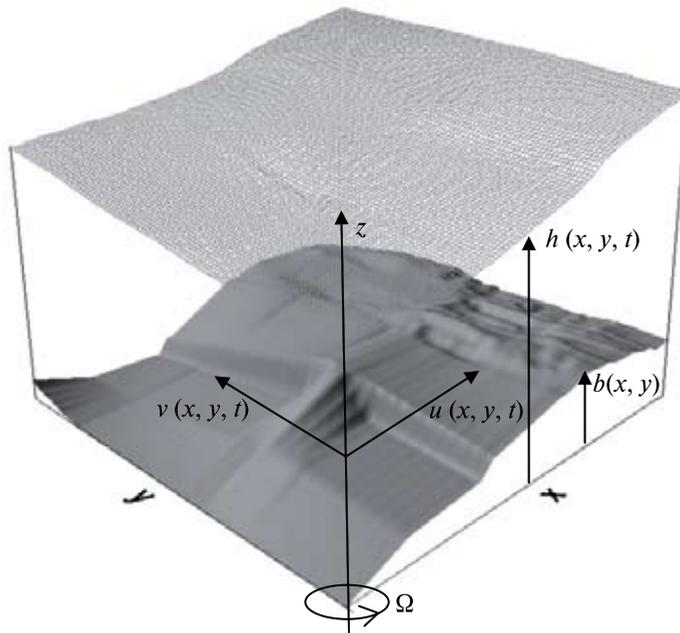


Рис. 1. Вращающийся слой жидкости над неоднородной поверхностью

$f$  меняется линейно при движении по меридиану Земли. Действительно, если принять широту  $\varphi_0$  началом декартовой системы координат, то  $f$  можно разложить в ряд Тейлора следующим образом:

$$f(\varphi_0 + \delta\varphi) = f(\varphi_0) + \delta\varphi f'(\varphi_0) + O(\delta\varphi^2), \quad (3)$$

и учитывая, что для малого  $\delta\varphi$  выполняется тождество  $y = R\delta\varphi$ , а также пренебрегая квадратичными членами в (3), получим:

$$f = 2\Omega \sin \varphi_0 + \frac{2\Omega \cos \varphi_0}{R} y = f_0 + \beta y, \quad (4)$$

где  $R$  — радиус Земли;  $\beta = \frac{2\Omega \cos \varphi_0}{R}$ .

## 2. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СИЛЫ КОРИОЛИСА В МЕТОДАХ ГОДУНОВСКОГО ТИПА НА ОСНОВЕ КВАЗИДВУХСЛОЙНОЙ МОДЕЛИ

Наличие хорошо разработанного и апробированного численного аппарата вкупе с многократно протестированной программной реализацией сделало особенно привлекательным сведение решения задачи о вращающейся мелкой воде над ровной подстилающей поверхностью к решению задачи о течениях мелкой воды над комплексной нестационарной границей. Вообще говоря, даже формальное рассмотрение в уравнениях силы Кориолиса как члена, описывающего изменяющуюся геометрию подстилающей поверхности, не является вполне корректным. Действительно, для получения формального совпадения вида уравнений его необходимо представить как

$$fv = -g \frac{\partial}{\partial x} k, \quad fu = g \frac{\partial}{\partial y} k. \quad (5)$$

Тогда функция  $k(x, y, t)$  будет фиктивной границей, отвечающей за влияние силы Кориолиса. Система (2) для ровной подстилающей поверхности в присутствии силы Кориолиса переписется в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial huv}{\partial y} = -gh \frac{dk}{dx}, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial hvu}{\partial x} = -gh \frac{dk}{dy}. \end{cases} \quad (6)$$

Как нетрудно видеть, такое представление существенно сужает класс возможных решений, исключая из рассмотрения пространственно-неинтегрируемые поля скорости.

Соответствующая одномерная задача, получаемая редукцией данной системы (6) по одной из пространственных координат с точностью до проекции уравнения импульсов на нередуцированное пространственное направление, отвечает одномерной задаче уравнений мелкой воды над нестационарной комплексной подстилающей поверхностью. Пренебрегая в (6) производными для определенности, например, по  $y$ , получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} = fhv, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hvu)}{\partial x} = -fhu. \end{cases} \quad (7)$$

Основополагающей для всех методов годововского типа является задача распада произвольного разрыва, т. е. одномерная постановка задачи Коши для двух полубесконечных областей, в каждой из которых значения всех гидродинамических параметров постоянны в начальный момент времени. Очевидно, что при наличии силы Кориолиса такая задача имеет физический смысл лишь для достаточно малого временного промежутка, поскольку ее общее решение ищется в виде совокупности частных автомодельных решений. Для простоты изложения будем считать, что в обеих областях все гидродинамические параметры совпадают, кроме трансверсальной составляющей скорости. С физической точки зрения это означает, что поток жидкости, проходя через границу областей, теряет часть импульса, переходящую под влиянием силы Кориолиса в импульс перпендикулярного направления (рис. 2). Однако в одномерном представлении такой переход, безусловно, носит диссипативный характер, следовательно, в модельном представлении он эквивалентен торможению потока в исследуемом направлении. С учетом замены (5) в конечно-разностной реализации для достаточно малого промежутка времени возможно указать некую фиктивную высоту ступеньки, определяемую разностью значений трансверсальных составляющих вектора в соседних областях, воспроизводящую воздействие силы Кориолиса (рис. 3). Таким образом, поток может быть разделен на две

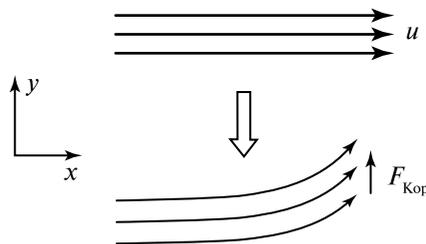


Рис. 2. Влияние силы Кориолиса  $F_{\text{Кор}}$  на поток жидкости

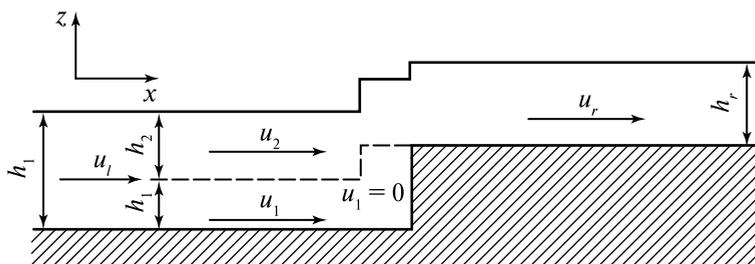


Рис. 3. Квазидвухслойное представление

части: нижнюю, с параметрами потока  $h_1$  и  $u_1$ , в которой происходит задержание переноса массы, и верхнюю, с параметрами потока  $h_2$  и  $u_2$ , формирующуюся в результате этого задержания.

Если ввести разностную сетку с пространственным шагом  $X$  в направлении  $x$  и рассмотреть две соседние ячейки по  $x$ , то, согласно формуле (5), в левой ячейке будем иметь (усредняя по ячейке) фиктивную границу с тангенсом угла наклона  $fv_l X/g$  и  $fv_r X/g$  — в правой ячейке. Тогда разница средних высот фиктивной поверхности на границе двух соседних ячеек составит:

$$K_f = \frac{|fv_r X/g + fv_l X/g|}{2}. \quad (8)$$

Таким образом, интерпретация члена в уравнениях (2), содержащего параметр Кориолиса как некую фиктивную границу, приобретает физический смысл. Действительно, аппроксимируем подстилающую поверхность кусочно-постоянной функцией, т. е. представим ее совокупностью горизонтальных и вертикальных участков плоскостей так, что каждая ячейка принадлежит участку подстилающей поверхности с ровным горизонтальным дном, тогда граница каждой ячейки будет содержать фиктивную ступенчатую границу, определяемую соотношением (8).

В результате задача расчета потоков мелкой воды в присутствии силы Кориолиса становится идентична задаче расчета потоков мелкой воды над нестационарной неоднородной подстилающей поверхностью. В работах (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005а, б; Славин и др., 2005; Славин, 2006; Karelsky et al., 2006, 2007а, б) предложен квазидвухслойный метод расчета потоков мелкой воды над неоднородной подстилающей поверхностью, также применимый и в случае нестационарных подстилающих поверхностей. В работах показано, что метод успешно преодолевает проблему возмущений, вносимых особенностями аппроксимации неровной поверхности, обусловливаемых негидростатичностью давления и зависимостью горизонтальной скорости от вертикальной координаты. В работах (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005а, б; Славин и др., 2005; Славин, 2006; Karelsky et al., 2006, 2007а, б) метод был апробирован на различных гидродинамических задачах, сопоставлен с аналитическими решениями и отлично

себя зарекомендовал в сравнении с наиболее известными на данный момент методами расчета течений над неоднородными поверхностями, в том числе и нестационарными.

Основная идея квазидвухслойной модели (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005а, б; Славин и др., 2005; Славин, 2006; Karelsky et al., 2006, 2007а, б), учитывающей влияние силы Кориолиса на поток, состоит в разбиении потока жидкости или газа на две части, так что для верхней части влияние силы Кориолиса косвенно, а для нижней части сила Кориолиса влияет непосредственно, останавливая перенос массы в этой части потока (см. рис. 3, где  $h_l$  и  $u_l$  — параметры потока слева от фиктивной ступенчатой границы,  $h_r$  и  $u_r$  — справа). В зависимости от параметров потока у ступенчатой границы вычисляются глубины нижнего и верхнего слоев жидкости, и для вычисления параметров потока на грани решается классическая задача Римана для параметров верхнего слоя. Предложенный метод адаптируется к параметрам потока и позволяет учитывать особенности течения жидкости в каждой точке пространства и в каждый момент времени.

Применение квазидвухслойной модели позволило определить структуру вертикальной неоднородности течения под влиянием силы Кориолиса, представленной фиктивной подстилающей поверхностью. Действительно, рассмотрим структуру течения у ступенчатой границы (рассмотрим область, по которой будем проводить интегрирование для нахождения трансверсальной составляющей скорости, половину ячейки, примыкающей к ступенчатой границе слева) в случаях натекания и стекания жидкости. На рис. 4, 5 (см. с. 192) показаны примеры возможной волновой картины. В общем случае в зависимости от параметров потока возможны другие волновые картины, что учтено при разработке численного алгоритма.

Тогда из третьего уравнения системы (7) можно в стационарном случае вычислить изменение трансверсальной скорости:

$$V_{x+1/2} = \frac{H_x U_x V_x - f \int_x^{x+1/2} h u dx}{H_{x+1/2} U_{x+1/2}}, \quad (9)$$

где значение интеграла  $\int_x^{x+1/2} h u dx$  определяется площадью, показанной на рис. 4, 5 серым цветом.

### 3. МЕТОД ГОДУНОВА ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ МЕЛКОЙ ВОДЫ НАД РОВНОЙ ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ С ПРИМЕНЕНИЕМ КВАЗИДВУХСЛОЙНОГО МЕТОДА

Для получения разностной схемы проинтегрируем систему уравнений двухслойной вращающейся мелкой воды (Pedlosky, 2003) над ровной подстилающей поверхностью:

$$\left\{ \begin{aligned} & \iiint_G \left( \frac{\partial(h_1 + h_2)}{\partial t} + \frac{\partial(h_1 u_1)}{\partial x} + \frac{\partial(h_2 u_2)}{\partial x} + \frac{\partial(h_1 v_1)}{\partial y} + \frac{\partial(h_2 v_2)}{\partial y} \right) dx dy dt = 0, \\ & \iiint_G \left( \frac{\partial(h_1 u_1)}{\partial t} + \frac{\partial(h_1 u_1^2 + gh_1^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial h_1 u_1 v_1}{\partial y} + \frac{\partial(h_2 u_2)}{\partial t} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial(h_2 u_2^2 + gh_2^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial h_2 u_2 v_2}{\partial y} - fh_1 v_1 - fh_2 v_2 + g \frac{\partial h_2 h_1}{\partial x} \right) dx dy dt = 0, \\ & \iiint_G \left( \frac{\partial(h_1 v_1)}{\partial t} + \frac{\partial(h_1 v_1^2 + gh_1^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial h_1 v_1 u_1}{\partial x} + \frac{\partial(h_2 v_2)}{\partial t} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial(h_2 v_2^2 + gh_2^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial h_2 v_2 u_2}{\partial x} + fh_1 u_1 + fh_2 u_2 + g \frac{\partial h_2 h_1}{\partial x} \right) dx dy dt = 0, \end{aligned} \right. \quad (10)$$

где  $G(x, y, t)$  — произвольная ненулевая область, гомеоморфная пространственно-временному кубу;  $h_1, u_1$  — параметры нижнего слоя;  $h_2, u_2$  — параметры верхнего слоя. Переходя в (10) к поверхностным интегралам, получим следующую интегральную форму:

$$\left\{ \begin{aligned} & \iint_S (h_1 + h_2) dx dy + h_1 u_1 dy dt + h_1 v_1 dx dt + h_2 u_2 dy dt + h_2 v_2 dx dt = 0, \\ & \iint_S (h_1 u_1 + h_2 u_2) dx dy + (h_1 u_1^2 + gh_1^2/2 + h_2 u_2^2 + gh_2^2/2 + gh_1 h_2) dy dt + \\ & \quad + (h_1 u_1 v_1 + h_2 u_2 v_2) dx dt - \iiint_G (fh_1 v_1 + fh_2 v_2) dx dy dt = 0, \\ & \iint_S (h_1 v_1 + h_2 v_2) dx dy + (h_1 v_1^2 + gh_1^2/2 + h_2 v_2^2 + gh_2^2/2 + gh_1 h_2) dx dt + \\ & \quad + (h_1 v_1 u_1 + h_2 v_2 u_2) dy dt + \iiint_G (fh_1 u_1 + fh_2 u_2) dx dy dt = 0, \end{aligned} \right. \quad (11)$$

где  $S$  — граница области  $G(x, y, t)$ . Применим интегральные законы сохранения (11) к каждой ячейке, выбирая в качестве  $S$  поверхность, определяемую границей ячейки за временной шаг  $\tau$ , учитывая, что на гранях ячейки:

$$\begin{aligned} x = x_1 &\Rightarrow h_1 + h_2 = \tilde{H}, \quad h_1 = k_{1,y}, \quad u_1 = 0, \quad u_2 = \tilde{U}; \\ x = x_2 &\Rightarrow h_1 + h_2 = \tilde{H}, \quad h_1 = k_{2,y}, \quad u_1 = 0, \quad u_2 = \tilde{U}; \\ y = y_1 &\Rightarrow h_1 + h_2 = \tilde{H}, \quad h_1 = k_{x,1}, \quad v_1 = 0, \quad v_2 = \tilde{V}; \\ y = y_2 &\Rightarrow h_1 + h_2 = \tilde{H}, \quad h_1 = k_{x,2}, \quad v_1 = 0, \quad v_2 = \tilde{V}. \end{aligned}$$

Учитывая тождество  $gh_1^2/2 + gh_2^2/2 + gh_1 h_2 \equiv g(h_1 + h_2)^2/2$  и соотношения, вытекающие из представления (5):

$$\int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} f \tilde{H} \tilde{V} \, dx \, dy \, dt = \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} (gh_2 k_{2,y}) \Big|_{x=x+1/2} \, dy \, dt - \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} (gh_2 k_{1,y}) \Big|_{x=x-1/2} \, dy \, dt,$$

$$\int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} f \tilde{H} \tilde{U} \, dx \, dy \, dt = \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} (gh_2 k_{x,2}) \Big|_{y=y+1/2} \, dx \, dt - \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} (gh_2 k_{x,1}) \Big|_{y=y-1/2} \, dx \, dt,$$

получим

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \tilde{H} \Big|_{t=\tau} \, dx \, dy - \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \tilde{H} \Big|_{t=0} \, dx \, dy + \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} \tilde{H} \tilde{U} \Big|_{x=x+1/2} \, dy \, dt - \\ & - \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} \tilde{H} \tilde{U} \Big|_{x=x-1/2} \, dy \, dt + \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} \tilde{H} \tilde{V} \Big|_{y=y+1/2} \, dx \, dt - \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} \tilde{H} \tilde{U} \Big|_{y=y-1/2} \, dx \, dt = 0, \\ & \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \tilde{H} \tilde{U} \Big|_{t=\tau} \, dx \, dy - \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \tilde{H} \tilde{U} \Big|_{t=0} \, dx \, dy + \\ & + \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} \left( h_2 \tilde{U}^2 + \frac{1}{2} g (h_2 + k_{2,y})^2 \right) \Big|_{x=x+1/2} \, dy \, dt - \\ & - \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} \left( h_2 \tilde{U}^2 + \frac{1}{2} g (h_2 + k_{1,y})^2 \right) \Big|_{x=x-1/2} \, dy \, dt + \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} h_2 \tilde{U} \tilde{V} \Big|_{y=y+1/2} \, dx \, dt - \\ & - \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} \tilde{H} \tilde{U} \tilde{V} \Big|_{y=y-1/2} \, dx \, dt = 0, \\ & \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \tilde{H} \tilde{V} \Big|_{t=\tau} \, dx \, dy - \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_{y-1/2}^{y+1/2} \tilde{H} \tilde{V} \Big|_{t=0} \, dx \, dy + \\ & + \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} \left( h_2 \tilde{V}^2 + \frac{1}{2} g (h_2 + k_{x,2})^2 \right) \Big|_{y=y+1/2} \, dx \, dt - \\ & - \int_{x-1/2}^{x+1/2} \int_t^{t+\tau} \left( h_2 \tilde{V}^2 + \frac{1}{2} g (h_2 + k_{x,1})^2 \right) \Big|_{y=y-1/2} \, dx \, dt + \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} h_2 \tilde{V} \tilde{U} \Big|_{x=x+1/2} \, dy \, dt - \\ & - \int_{y-1/2}^{y+1/2} \int_t^{t+\tau} \tilde{H} \tilde{V} \tilde{U} \Big|_{x=x-1/2} \, dy \, dt = 0, \end{aligned} \right. \tag{12}$$

где  $x \pm 1/2$ ,  $y \pm 1/2$  — значения координаты границ ячейки с номером  $(x, y)$ .

Применяя в (12) теорему о среднем и полагая, что на границе ячейки значения всех гидродинамических параметров являются решениями соответствующей одномерной задачи на протяжении всего временного шага интегрирования, получим разностную схему:

$$\begin{aligned}
 H_{x,y}^{t+1} &= H_{x,y}^t + \tau \left( \frac{H_{x-1/2,y}^t U_{x-1/2,y}^t - H_{x+1/2,y}^t U_{x+1/2,y}^t}{X} + \frac{H_{x,y-1/2}^t V_{x,y-1/2}^t - H_{x,y+1/2}^t V_{x,y+1/2}^t}{Y} \right), \\
 U_{x,y}^{t+1} &= \tau \frac{\left( \frac{g \left( H_{x-1/2,y}^t + i \times \frac{(K_{x,y} + K_{x-1,y})}{2} \right)^2}{2} + H_{x-1/2,y}^t (U_{x-1/2,y}^t)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{g \left( H_{x+1/2,y}^t + i \times \frac{(K_{x+1,y} + K_{x,y})}{2} \right)^2}{2} - H_{x+1/2,y}^t (U_{x+1/2,y}^t)^2 \right)}{X H_{x,y}^{t+1}} + \\
 &\quad + \tau \frac{H_{x,y-1/2}^t U_{x,y-1/2}^t V_{x,y-1/2}^t - H_{x,y+1/2}^t U_{x,y+1/2}^t V_{x,y+1/2}^t}{Y H_{x,y}^{t+1}} + \frac{H_{x,y}^t U_{x,y}^t}{H_{x,y}^{t+1}}, \\
 V_{x,y}^{t+1} &= \tau \frac{\left( \frac{g \left( H_{x,y-1/2}^t + i \times \frac{(K_{x,y} + K_{x,y-1})}{2} \right)^2}{2} + H_{x,y-1/2}^t (U_{x,y-1/2}^t)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{g \left( H_{x,y+1/2}^t + i \times \frac{(K_{x,y+1} + K_{x,y})}{2} \right)^2}{2} - H_{x,y+1/2}^t (U_{x,y+1/2}^t)^2 \right)}{Y H_{x,y}^{t+1}} + \\
 &\quad + \tau \frac{H_{x-1/2,y}^t U_{x-1/2,y}^t V_{x-1/2,y}^t - H_{x+1/2,y}^t U_{x+1/2,y}^t V_{x+1/2,y}^t}{X H_{x,y}^{t+1}} + \frac{H_{x,y}^t V_{x,y}^t}{H_{x,y}^{t+1}},
 \end{aligned} \tag{13}$$

где  $\tau$  — шаг по времени;  $X$  и  $Y$  — шаги по пространству;  $H$  — глубина жидкости;  $U$  — скорость в направлении  $x$ ;  $V$  — скорость в направлении  $y$ . Нижние индексы  $x, y$  — значения функции, отнесенные к центру масс ячейки с номером  $(x, y)$ . Полуцелые индексы  $x \pm 1/2, y \pm 1/2$  — значения величин на границе между ячейками с номерами  $x, x \pm 1$ , и  $y, y \pm 1$  соответственно. Верхний индекс  $t$  обозначает номер шага по времени,  $f$  — параметр Кориолиса,  $K_{x,y}$  — высоту фиктивной границы. Согласно формуле (8) получим:

$$\begin{aligned}
 \frac{K_{x+1,y} + K_{x,y}}{2} &= \frac{|f v_{x+1,y} X / g + f v_{x,y} X / g|}{2}, \\
 \frac{K_{x,y} + K_{x-1,y}}{2} &= \frac{|f v_{x,y} X / g + f v_{x-1,y} X / g|}{2},
 \end{aligned}$$

$$\frac{K_{x,y+1} + K_{x,y}}{2} = \frac{|fv_{x,y+1}X/g + fv_{x,y}X/g|}{2},$$

$$\frac{K_{x,y} + K_{x,y-1}}{2} = \frac{|fv_{x,y}X/g + fv_{x,y-1}X/g|}{2}.$$

Переменная  $i$  принимает значение либо 0 в случае отрицательного перепада соответствующих высот  $(K_{x+1,y} + K_{x,y})/2$ ,  $(K_{x,y+1} + K_{x,y})/2$ ,  $(K_{x,y} + K_{x-1,y})/2$ ,  $(K_{x,y} + K_{x,y-1})/2$  фиктивной границы, либо  $0 \leq i \leq 1$  в случае положительного перепада. Эта переменная получает значение, равное 1, в случае если  $H^*$ , определяемое при решении задачи Римана над ступенчатой границей с помощью квазидвухслойной модели мелкой воды (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005а, б; Славин и др., 2005; Славин, 2006; Karelsky et al., 2006, 2007а, б) для соответствующей грани ячейки  $(x, y)$ , не превышает значения глубины внутри нее. В противном случае значение  $i$  на соответствующей грани является отношением глубины, формирующейся при полном торможении потока  $(H_{x,y}^t, U_{x,y}^t, V_{x,y}^t)$  на указанной грани, к соответствующему фиктивному перепаду высот. Значения  $H_{x\pm 1/2, y\pm 1/2}^t$ ,  $U_{x\pm 1/2, y\pm 1/2}^t$ ,  $V_{x\pm 1/2, y\pm 1/2}^t$  на гранях вычисляются путем решения соответствующих задач Римана.

Вид изучаемых уравнений гиперболический, поэтому в качестве условия устойчивости, по аналогии с уравнениями мелкой воды без учета силы Кориолиса (Куликовский и др., 2001), в данном методе используется стандартное условие Куранта – Фридрихса, в котором, однако, должна учитываться скорость распространения возмущений, в том числе и в фиктивном нижнем слое. То есть шаг по времени не может превышать минимальное по всем ячейкам время, за которое возмущения в каждом слое проходят половину ячейки, с учетом коррекции на двумерную постановку:

$$\tau = R \frac{\Delta t_x \Delta t_y}{\Delta t_x + \Delta t_y}, \quad (14)$$

где  $\Delta t_x, \Delta t_y$  — минимальные времена распространения возмущений по осям абсцисс и ординат соответственно;  $R < 1$  — дополнительный коэффициент для увеличения надежности, в нижеприведенных расчетах принимаемый равным 0,4. Успешность выбора критерия устойчивости в таком виде подтверждают приведенные ниже тестовые расчеты.

#### 4. СРАВНЕНИЕ ПРЕДЛОЖЕННОГО АЛГОРИТМА С ИЗВЕСТНЫМИ МЕТОДАМИ ТИПА WELL-BALANCE

Для сравнения предложенного алгоритма рассмотрим разностные схемы, используемые в известных методах расчета течений мелкой воды с учетом влияния силы Кориолиса. Для упрощения изложения все выкладки приведены

в случае одномерной разностной схемы для ячейки, слева примыкающей к фиктивной ступеньке высоты  $a$ . Запишем разностную схему для wave-propagation-метода (*Le Veque*, 1998a, b) в явном виде. Метод основан на решении дополнительной задачи Римана в центре каждой ячейки, внутри которой разность потоков подбирается таким образом, чтобы в точности уравновесить влияние силы Кориолиса в стационарном случае. Таким образом, на шаге предиктора рассчитываются параметры потока  $h_{x-}, u_{x-}$  и  $h_{x+}, u_{x+}$  внутри ячейки, а затем на шаге корректора с использованием гидродинамических переменных, полученных на шаге предиктора, вычисляются параметры потока на гранях ячейки  $h_{i-1/2}, u_{i-1/2}$  и  $h_{x+1/2}, u_{x+1/2}$  (рис. 6, 7). Фактически такой подход соответствует горизонтальному перераспределению импульса и массы внутри рассматриваемой ячейки, чтобы скомпенсировать влияние ступеньки. Наличие такого подсеточного разрыва обеспечивает описание недивергентной правой части системы уравнений (6) благодаря дополнительному источнику импульса. В результате рассматривается стандартная система уравнений мелкой воды над ровной поверхностью с модифицированными потоками через грани ячеек.

Для получения разностной схемы интегрируем по каждой из частей ячейки, полученных при фиктивном разбиении всей ячейки в центре:

$$\left\{ \begin{aligned} & \iint_{G_{left}} h dx + hu dt + \iint_{G_{right}} h dx + hu dt = 0, \\ & \iint_{G_{left}} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (hu) + \frac{\partial}{\partial x} \left( hu^2 + \frac{1}{2} gh^2 \right) \right] dx dt + \iint_{G_{right}} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (hu) + \frac{\partial}{\partial x} \left( hu^2 + \frac{1}{2} gh^2 \right) \right] dx dt = 0, \end{aligned} \right. \quad (15)$$

применение формулы Остроградского – Гаусса преобразует (15) к виду:

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{x-1/2}^x h|_{t=t+1} dx + \int_x^{x+1/2} h|_{t=t+1} dx - \int_{x-1/2}^x h|_{t=t} dx - \int_x^{x+1/2} h|_{t=t} dx + \\ & \quad + \int_t^{t+1} (hu)|_{x+1/2} dt - \int_t^{t+1} (hu)|_{x-1/2} dt + \int_t^{t+1} (hu)|_{x+} dt - \int_t^{t+1} (hu)|_{x-} dt = 0, \\ & \int_{x-1/2}^x (hu)|_{t=t+1} dx + \int_x^{x+1/2} (hu)|_{t=t+1} dx - \int_{x-1/2}^x (hu)|_{t=t} dx - \int_x^{x+1/2} (hu)|_{t=t} dx + \\ & \quad + \int_t^{t+1} \left( hu^2 + \frac{1}{2} gh^2 \right) \Big|_{x+1/2} dt - \int_t^{t+1} \left( hu^2 + \frac{1}{2} gh^2 \right) \Big|_{x-1/2} dt + \\ & \quad + \int_t^{t+1} \left( hu^2 + \frac{1}{2} gh^2 \right) \Big|_{x-} dt - \int_t^{t+1} \left( hu^2 + \frac{1}{2} gh^2 \right) \Big|_{x+} dt = 0. \end{aligned} \right. \quad (16)$$

Использование теоремы о среднем и осуществление интегрирования позволяет переписать систему (16) в виде:

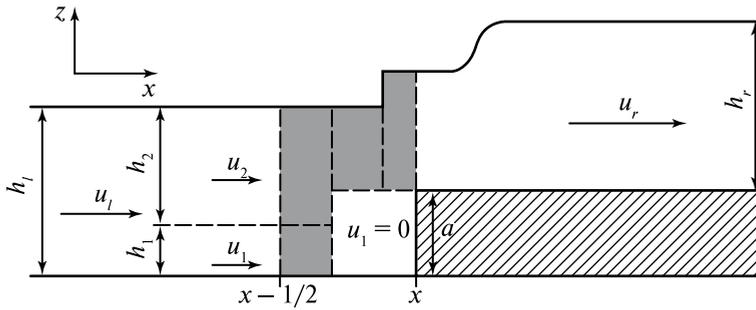


Рис. 4. Структура течения при натекании жидкости

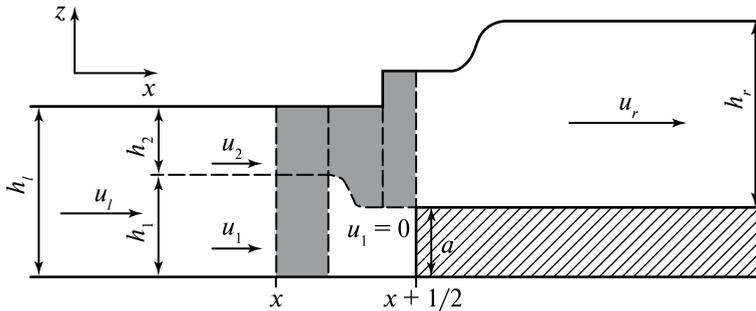


Рис. 5. Структура течения при стекании жидкости

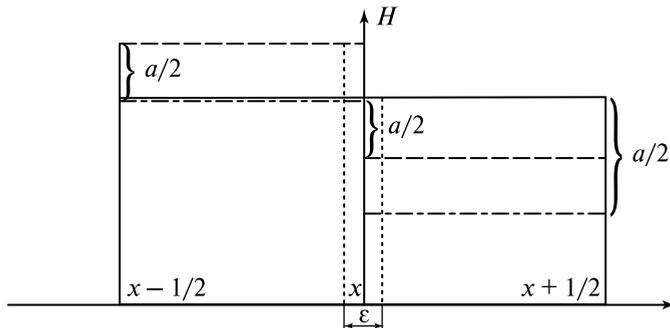


Рис. 6. Схема корректировки параметров потока в wave-propagation-методе (Le Veque, 1998a, b) (пунктирная линия) и well-balancing-методе (Audusse et al., 2004; Bouchut et al., 2004; Reznik et al., 2001) (штрихпунктирная линия)

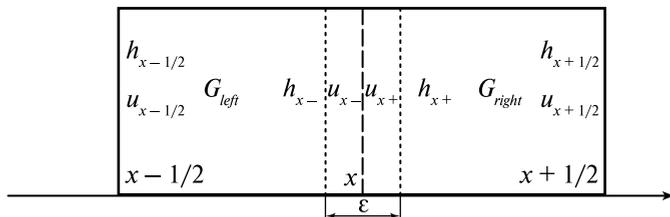


Рис. 7. Разделение ячейки на две половины в wave-propagation-методе (Le Veque, 1998a, b)

$$\left\{ \begin{aligned} & H_x^{t+1} \frac{1}{2} \Delta x + H_x^{t+1} \frac{1}{2} \Delta x - H_x^t \frac{1}{2} \Delta x - H_x^t \frac{1}{2} \Delta x + H_{x+1/2} U_{x+1/2} \tau - H_{x-1/2} U_{x-1/2} \tau = 0, \\ & H_x^{t+1} U_x^{t+1} \frac{1}{2} \Delta x + H_x^{t+1} U_x^{t+1} \frac{1}{2} \Delta x - H_x^t U_x^t \frac{1}{2} \Delta x - H_x^t U_x^t \frac{1}{2} \Delta x + \\ & \quad + (H_{x+1/2} U_{x+1/2}^2 + \frac{1}{2} g H_{x+1/2}^2) \tau - (H_{x-1/2} U_{x-1/2}^2 + \frac{1}{2} g H_{x-1/2}^2) \tau + \\ & \quad + \left( \left( H_x + \frac{a}{2} \right) U_{x+}^2 + \frac{1}{2} g \left( H_x + \frac{a}{2} \right)^2 \right) \tau - \left( \left( H_x - \frac{a}{2} \right) U_{x+}^2 + \frac{1}{2} g \left( H_x - \frac{a}{2} \right)^2 \right) \tau = 0. \end{aligned} \right. \quad (17)$$

Учитывая, что в центре ячейки решается стационарная задача, для которой  $H_{x+}^t = H_x^t + \frac{1}{2} a$ ,  $H_{x-}^t = H_x^t - \frac{1}{2} a$ , и в малой области  $\varepsilon$ :  $U_{x+} = U_{x-} = 0$  (Le Veque, 1998a), система (17) преобразуется в следующую разностную схему:

$$\left\{ \begin{aligned} & H_x^{t+1} = H_x^t + \tau \left( \frac{H_{x-1/2}^t U_{x-1/2}^t - H_{x+1/2}^t U_{x+1/2}^t}{X} \right), \\ & U_x^{t+1} = \tau \left( \frac{H_{x-1/2} U_{x-1/2}^2 + \frac{1}{2} g H_{x-1/2}^2 -}{X H_x^{t+1}} \right. \\ & \quad \left. \frac{-H_{x+1/2} U_{x+1/2}^2 - \frac{1}{2} g H_{x+1/2}^2 - g H_x^t a}{X H_x^{t+1}} \right) + \frac{H_x^t U_x^t}{H_x^{t+1}}. \end{aligned} \right. \quad (18)$$

Второе уравнение полученной разностной схемы формально совпадает со вторым уравнением квазидвухслойной схемы (13) при следующем условии:

$$H_x = H_{x+1/2} + \frac{a}{2}, \quad (19)$$

где потоковая величина  $H_{x+1/2}$  вычисляется квазидвухслойным методом.

Нужно отметить, что в wave-propagation-методе параметры потока на границе ячейки  $H_{x+1/2}$ ,  $U_{x+1/2}$  вычисляются как решение задачи распада разрыва для начальных параметров слева  $H_x + \frac{a}{2}$ ,  $U_x$  и справа  $H_{x+1}$ ,  $U_{x+1}$  от плоскости разрыва, в то время как в квазидвухслойном методе  $H_{x+1/2}$  вычисляется как решение задачи распада разрыва для начальных параметров слева:  $H_x - H^*$ ,  $U_x -$  и справа  $H_{x+1}$ ,  $U_{x+1}$  от плоскости разрыва.

Разностная схема, предложенная в работах (Audusse et al., 2004; Bouchut et al., 2004; Reznik et al., 2001), также интерпретирует член, содержащий параметр Кориолиса как некую фиктивную границу. В основе метода (Audusse et al., 2004; Bouchut et al., 2004; Reznik et al., 2001) лежит схема гидростатической реконструкции подсчета потоков на гранях ячеек, использующая решения стационарных состояний. В одномерном случае разностная схема получается из классической схемы для ровной подстилающей поверхности добавлением

в схему источниковых членов  $\frac{1}{2}gH_{x+1/2-}^2$ ,  $\frac{1}{2}gH_{x-1/2+}^2$  и использованием на границах, подкорректированных с учетом гидростатического баланса, параметров потока. Схема выглядит следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_x^{t+1} = H_x^t + \tau \left( \frac{H_{x-1/2}^t U_{x-1/2}^t - H_{x+1/2}^t U_{x+1/2}^t}{X} \right), \\ U_x^{t+1} = \tau \left( \frac{H_{x-1/2} U_{x-1/2}^2 + \frac{1}{2}gH_{x-1/2}^2 - H_{x+1/2} U_{x+1/2}^2 - \frac{1}{2}gH_{x+1/2}^2 + \frac{1}{2}gH_{x+1/2-}^2 - \frac{1}{2}gH_{x-1/2+}^2}{XH_x^{t+1}} \right) + \frac{H_x^t U_x^t}{H_x^{t+1}}. \end{array} \right. \quad (20)$$

Используя условие гидростатического баланса (Bouchut et al., 2004), получим, что в случае ступеньки высоты  $a$  справа от рассматриваемой ячейки  $H_{x+1/2-} = H_x - a$ ,  $H_{x-1/2+} = H_x$ . Тогда разностная схема переписется в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_x^{t+1} = H_x^t + \tau \left( \frac{H_{x-1/2}^t U_{x-1/2}^t - H_{x+1/2}^t U_{x+1/2}^t}{X} \right), \\ U_x^{t+1} = \tau \left( \frac{H_{x-1/2} U_{x-1/2}^2 + \frac{1}{2}gH_{x-1/2}^2 - H_{x+1/2} U_{x+1/2}^2 - \frac{1}{2}gH_{x+1/2}^2 + \frac{1}{2}ga^2 - gH_x a}{XH_x^{t+1}} \right) + \frac{H_x^t U_x^t}{H_x^{t+1}}. \end{array} \right. \quad (21)$$

Второе уравнение схемы (21), так же как и схемы (18), формально совпадает со вторым уравнением схемы (13) при условии:

$$H_x = H_{x+1/2} + a, \quad (22)$$

где потоковая величина  $H_{x+1/2}$  вычисляется квазидвухслойным методом.

Отметим, что в методе, предложенном в работах (Audusse et al., 2004; Bouchut et al., 2004; Reznik et al., 2001),  $H_{x+1/2}$ ,  $U_{x+1/2}$  вычисляется как решение задачи распада разрыва для начальных параметров слева:  $H_x - a$ ,  $U_x$  — и справа  $H_{x+1}$ ,  $U_{x+1}$  от плоскости разрыва, в то время как в квазидвухслойном методе  $H_{x+1/2}$  вычисляется как решение задачи распада разрыва для начальных параметров слева:  $H_x - H^*$ ,  $U_x$  — и справа  $H_{x+1}$ ,  $U_{x+1}$  от плоскости разрыва.

Вообще говоря, разностная схема, приведенная в работах (Audusse et al., 2004; Bouchut et al., 2004; Reznik et al., 2001), может быть получена тем же методом, что и схема, представленная в работах (Le Veque, 1998a, b). Действительно, достаточно рассмотреть в методе Левека на шаге предиктор в качестве стационарной гидростатической задачу с дополнительным источником, соответствующим принципу well-balance (см. рис. 6, wave-propagation-метод (Le Veque,

1998a, b) — пунктирная линия, и well-balancing-метод (Audusse et al., 2004; Bouchut et al., 2004; Reznik et al., 2001) — штрихпунктирная линия). Важно подчеркнуть, что в работах (Беликов, Семенов, 1997; Куликовский и др., 2001), посвященных численному моделированию классической системы Сен-Венана, аналогичный подход перераспределения массы внутри ячейки дал вполне удовлетворительный результат, при этом в отличие от ситуации с недифференцируемой неоднородностью правой части в указанном методе не требовалось введения дополнительных распадов разрыва внутри ячейки, поскольку после интегрирования соответствующих дифференциальных уравнений полученные балансовые уравнения содержали необходимый член, описывающий влияние наклона подстилающей поверхности в явном виде.

Принимая во внимание, что конечно-разностное представление для закона сохранения импульса с учетом (19) и (22) формально совпадает с точностью до способа нахождения потоковых величин на гранях ячейки, оба метода можно считать частными случаями квазидвухслойной модели, в которой  $H_{x+1/2}$  вычисляется с использованием для рассматриваемой задачи глубины потока  $H_x - H^*$  слева от разрыва и  $H_{x+1}$  — справа, где  $H^*$  в зависимости от текущих гидродинамических значений и может принимать, сообразно физической ситуации, весь спектр значений  $[0, a]$  — при натекании потока на фиктивную границу и  $[a, H_x]$  — в противоположном случае. При этом в рассмотренных моделях коррекция потоковых величин на гранях вычисляемой ячейки не зависит от значений гидродинамических величин в соседних ячейках.

## 5. ПОВЫШЕНИЕ ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ МЕТОДА И РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данном разделе представлены и проанализированы расчеты течений мелкой воды в различных физических задачах. Промоделировано явление геострофической адаптации (Обухов, 1949; Cahn, 1945; Rossby, 1938). Хорошо известно, что возмущения синоптического масштаба в атмосфере и океане приблизительно удовлетворяют условиям геострофического баланса и всякое его локальное нарушение приводит к излучению акустико-гравитационных волн (Обухов, 1949; Cahn, 1945; Rossby, 1938), в результате чего равновесие восстанавливается за счет приспособления поля давления к измененному полю скорости. В частности, перенос масс в атмосфере происходит, на первый взгляд вопреки здравому смыслу, не поперек, а вдоль изобар. Поэтому воздушные массы в окрестности центра пониженного (повышенного) давления вращаются вокруг этого центра по сходящимся к нему (расходящимся от него) спиральям, образуя крупномасштабный вихрь — циклон (антициклон). Геострофическая адаптация, таким образом, разделяет любое движение на быструю (акустико-гравитационные волны) и медленную (уравновешенную) части. Причем вид этих частей однозначно определяется из начального возмущенного состояния. В работах (Blumen, 1972; Gill, 1982) изучался процесс геострофической адаптации в непрерывно-слоистой

жидкости, однако большинство исследований не вышло за рамки линейного приближения. В то же время остается большое количество нелинейных задач, связанных с геострофической адаптацией, требующих нелинеаризованного решения. На текущий момент для расчета явления геострофической адаптации успешно применяется модель вращающейся мелкой воды (Bouchut et al., 2004; Sommer et al., 2003; Reznik et al., 2001). Приведем результаты расчетов в сравнении с данными работ (Bouchut et al., 2004; Sommer et al., 2003).

Для численного моделирования применялся квазидвухслойный метод второго порядка точности по пространству и времени. Повышение пространственного порядка точности достигалось благодаря использованию кусочно-линейной реконструкции распределения значения функций внутри ячейки, с использованием ограничителя  $\min \text{mod}$ , впервые предложенного Колганом для решения газодинамических задач методами годуновского типа [6, 8]:

$$W_x^t = \min \text{mod} \left( \frac{F_{x+1}^t - F_x^t}{\Delta x}, \frac{F_x^t - F_{x-1}^t}{\Delta x} \right), \quad (23)$$

$$\min \text{mod}(a, b) = \alpha \frac{1}{2} (\text{sign} a + \text{sign} b) \min(|a|, |b|),$$

$$\text{где } F_x^t \equiv \begin{pmatrix} H_x^t \\ U_x^t \\ V_x^t \end{pmatrix}, \alpha = 0,72.$$

Второй порядок точности по времени достигался применением двухшагового алгоритма «предиктор – корректор». На стадии «предиктор» находились вспомогательные значения искомым величин для целого шага по времени с помощью квазидвухслойного алгоритма первого порядка точности, используемые для получения гидродинамических параметров на промежуточном шаге по времени арифметическим осреднением со значениями предыдущего временного шага. На шаге «корректор» данные величины реконструировались по пространству:  $F_x^{t+\frac{\tau}{2}} + \frac{1}{2} \Delta x W_x^t$ ,  $F_{x+1}^{t+\frac{\tau}{2}} - \frac{1}{2} \Delta x W_{x+1}^t$ , соответственно слева и справа от грани  $x + 1/2$ , и находились значения потоковых величин на границе ячеек, соответствующие промежуточному временному слою. Использовалась прямоугольная сетка размером  $200 \times 10$  ячеек.

В качестве тестовой была промоделирована классическая задача Россби (Reznik et al., 2001). Рассматривалось начальное возмущение:

$$\begin{cases} h(x, 0) = h_0, \\ u(x, 0) = 0, \\ v(x, 0) = V v_{jet}(x), \end{cases} \quad (24)$$

где  $h_0$  – начальная глубина покоя;  $V$  – характерный масштаб скорости;  $v_{jet}(x)$  – нормализованный профиль, задаваемый следующим образом:

$$v_{jet}(x) = \frac{(1 + \operatorname{tgh}(4x/L + 2))(1 - \operatorname{tgh}(4x/L - 2))}{(1 + \operatorname{tgh}(2))^2}. \quad (25)$$

Форма профиля представлена на рис. 8, где  $L$  — характерный масштаб возмущения. Характерные параметры  $g, h_0, f$  были зафиксированы. Характерные масштаб скорости  $V$  и масштаб возмущения  $L$  вычислялись из двух безразмерных параметров, числа Россби — Кибеля  $Ro$  и числа Бюргерса  $Bu$ :

$$Ro = \frac{V}{fL},$$

$$Bu = \frac{R_d^2}{L^2}, \quad (26)$$

где  $R_d$  — радиус деформации:  $R_d = \frac{\sqrt{gh_0}}{f}$ .

Характерный масштаб времени задается следующей формулой:  $T_f = (2\pi)/f$ . Ниже представлены результаты эволюции глубины  $h_0$  в случае  $Ro = 1, Bu = 0,25$ . На рис. 9 показана эволюция, полученная с помощью квазидвухслойной модели, хорошо соответствующая результатам, представленным в работе (Bouchut et al., 2004).

Наблюдается совпадение характерных пиков разбегающихся акустико-гравитационных волн и центральной уравновешенной части, что свидетельствует об эффективности использования квазидвухслойной модели при описании крупномасштабных геофизических явлений.

На рис. 10 приведено сравнение величин потенциальной завихренности в начальный ( $t = 0,2T_f$ ) и конечный ( $t = 16T_f$ ) моменты времени для классической задачи Россби (24) и  $Ro = 1, Bu = 0,5$ . Потенциальная завихренность задается следующей формулой:

$$Q = \frac{\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + f}{h}.$$

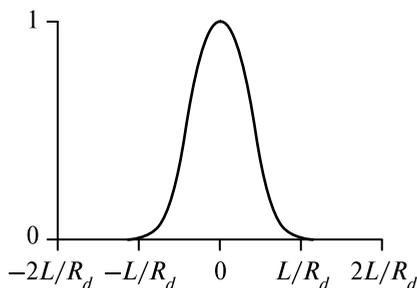
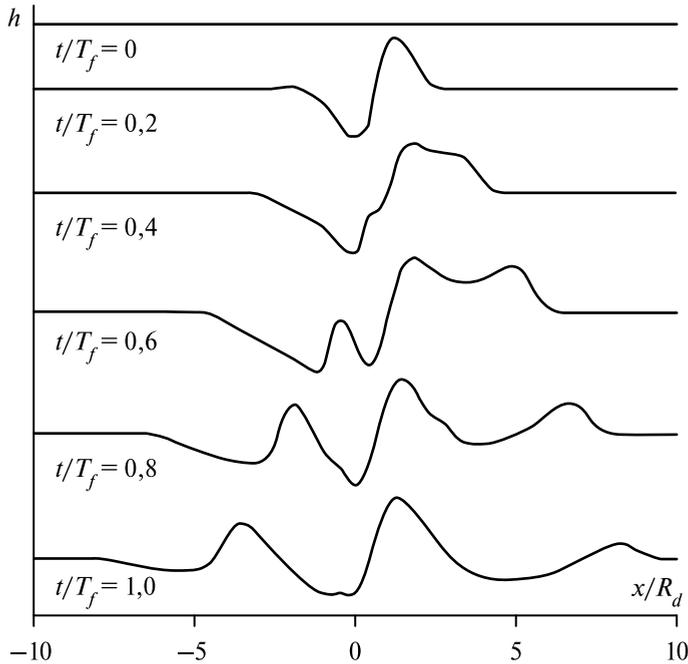


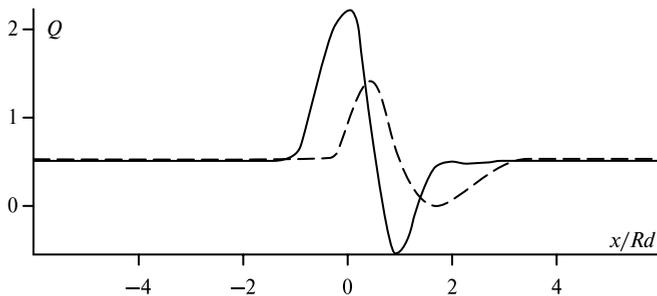
Рис. 8. Нормализованный профиль  $v_{jet}(x)$



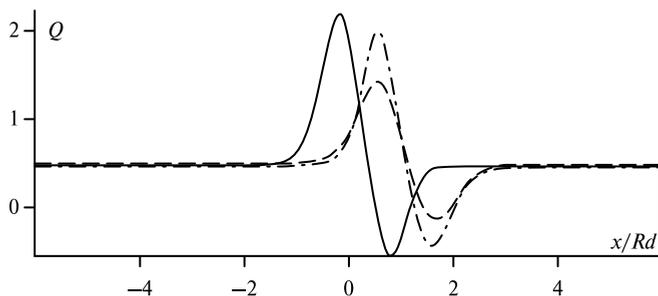
**Рис. 9.** Эволюция распространения акустико-гравитационных волн в результате воздействия начального возмущения  $V_{jet}(x)$  при использовании квазидвухслойного метода

Наблюдается сохранение инварианта  $Q$  — потенциального вихря со временем. Отметим, что реальное время процесса приблизительно равно 12 сут.

Из представленного графика видно, что максимум функции сдвигается в антициклонную область, а минимум потенциальной завихренности со временем увеличивается. Эти результаты определяются чисто нелинейными эффектами и хорошо согласуются с данными, полученными в работе (Sommer Le, 2003).



**Рис. 10.** Потенциальная завихренность в начальный (сплошная линия,  $t = 0,2T_f$ ) и конечный (пунктирная,  $t = 16T_f$ ) моменты времени

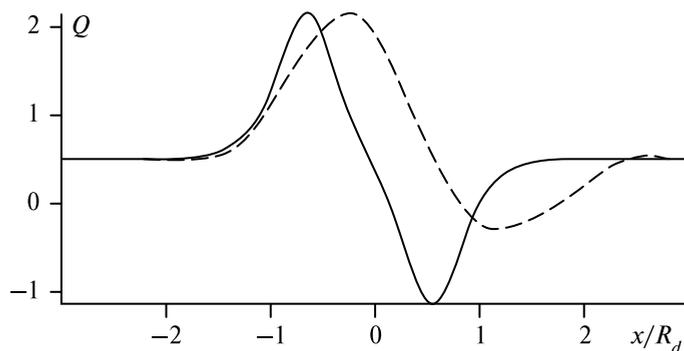


**Рис. 11.** Потенциальная завихренность в начальный (сплошная линия,  $t = 0,2T_f$ ), конечный при конвективном переносе (пунктирная линия,  $t = 5T_f$ ) и конечный при пересчете трансверсальной скорости (штрихпунктирная линия,  $t = 5T_f$ ) моменты времени

С использованием указанного в разд. 2 алгоритма пересчета трансверсальной составляющей скорости график потенциальной зависимости для классической задачи геострофической адаптации, известной как задача Россби, без применения заостряющей реконструкции выглядит следующим образом (рис. 11, штрихпунктирная линия). Для сравнения красным цветом показано значение потенциальной зависимости в случае, когда трансверсальная составляющая вектора скорости конвективно переносится тангенциальной (как это происходит в методах, представленных в работах (Audusse et al., 2004; Bouchut et al., 2004; Le Veque, 1998a, b; Reznik et al., 2001).

Наблюдается значительное улучшение сохранения потенциальной завихренности. Незначительное понижение амплитуды связано, как было указано выше, с системной вязкостью.

В случае применения заостряющей реконструкции, описываемой формулой (23), максимум потенциальной завихренности сохраняется (рис. 12).



**Рис. 12.** Потенциальная завихренность в начальный (сплошная линия,  $t = 0,2T_f$ ) и конечный (пунктирная линия,  $t = 16T_f$ ) моменты времени при применении заостряющей реконструкции (23)

## 6. МЕТОД ГОДУНОВА ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ВРАЩАЮЩЕЙСЯ МЕЛКОЙ ВОДЫ НАД ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ПРОИЗВОЛЬНОГО ПРОФИЛЯ В РАМКАХ КВАЗИДВУХСЛОЙНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Система уравнений вращающейся мелкой воды над подстилающей поверхностью произвольного профиля  $z = b(x, y)$  с учетом замены членов (5), отвечающих за влияние силы Кориолиса, записывается в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial huv}{\partial y} = -gh \frac{db}{dx} - gh \frac{dk}{dx}, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial hvu}{\partial x} = -gh \frac{db}{dy} - gh \frac{dk}{dy}. \end{cases} \quad (27)$$

Влияние членов  $-gh \frac{dk}{dx}$  и  $-gh \frac{dk}{dy}$  в сравнении с членами, отвечающими за подстилающую поверхность  $-gh \frac{db}{dx}$  и  $-gh \frac{db}{dy}$ , на каждом временном шаге на порядок меньше, поэтому для получения адекватной картины течения необходимо поддерживать вычислительную точность, соответствующую именно минимальным эффектам, определяемым силой Кориолиса.

Для построения расчетной сетки эффективная граница аппроксимируется кусочно-постоянной функцией. Граница представляется совокупностью горизонтальных и вертикальных участков плоскостей так, что каждая ячейка принадлежит участку эффективной границы с ровным горизонтальным дном. Очевидно, что при таком построении сетки каждая ячейка обладает собственной высотой дна, вообще говоря, различной для каждой ячейки и в каждый момент времени. Данный способ построения сетки может легко автоматизироваться, при условии что выдерживаются ограничения на максимальный перепад высот, допустимый для каждой ячейки, не принадлежащей области скачкообразных изменений профиля эффективной границы. В некоторых задачах полезно затем регуляризовывать сетку, измельчая до размеров минимальной полученной ячейки или до характерных размеров поставленной задачи. После этого начальные условия задачи представляются сеточной функцией, которая ставит в соответствие каждой ячейке с номером  $(x, y)$  четыре осредненные по ее площади величины:  $H_{x,y}$  — глубину жидкости,  $(V_{x,y}, U_{x,y})$  — вектор скорости жидкости,  $B_{x,y}$  — высоту подстилающей поверхности и  $K_{x,y}$  — высоту фиктивной границы. Применяя интегральные законы сохранения к каждой ячейке и полагая, что на границе ячейки значения всех гидродинамических параметров остаются неизменными на протяжении временного шага интегрирования, получим разностную схему:

$$\begin{aligned}
 H_{x,y}^{t+1} &= H_{x,y}^t + \tau \left( \frac{H_{x-1/2,y}^t U_{x-1/2,y}^t - H_{x+1/2,y}^t U_{x+1/2,y}^t}{X} + \frac{H_{x,y-1/2}^t V_{x,y-1/2}^t - H_{x,y+1/2}^t V_{x,y+1/2}^t}{Y} \right), \\
 U_{x,y}^{t+1} &= \tau \frac{\left( \frac{g \left( H_{x-1/2,y}^t + i \times \left( \frac{(B_{x,y} - B_{x-1,y}) + (K_{x,y} + K_{x-1,y})}{2} \right) \right)^2}{2} + H_{x-1/2,y}^t (U_{x-1/2,y}^t)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{g \left( H_{x+1/2,y}^t + i \times \left( \frac{(B_{x+1,y} - B_{x,y}) + (K_{x+1,y} + K_{x,y})}{2} \right) \right)^2}{2} - H_{x+1/2,y}^t (U_{x+1/2,y}^t)^2 \right)}{2 X H_{x,y}^{t+1}} + \\
 &\quad + \tau \left( \frac{H_{x,y-1/2}^t U_{x,y-1/2}^t V_{x,y-1/2}^t - H_{x,y+1/2}^t U_{x,y+1/2}^t V_{x,y+1/2}^t}{Y H_{x,y}^{t+1}} + \frac{H_{x,y}^t U_{x,y}^t}{H_{x,y}^{t+1}} \right), \quad (28) \\
 V_{x,y}^{t+1} &= \tau \frac{\left( \frac{g \left( H_{x,y-1/2}^t + i \times \left( \frac{(B_{x,y} - B_{x,y-1}) + (K_{x,y} + K_{x,y-1})}{2} \right) \right)^2}{2} + H_{x,y-1/2}^t (U_{x,y-1/2}^t)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{g \left( H_{x,y+1/2}^t + i \times \left( \frac{(B_{x,y+1} - B_{x,y}) + (K_{x,y+1} + K_{x,y})}{2} \right) \right)^2}{2} - H_{x,y+1/2}^t (U_{x,y+1/2}^t)^2 \right)}{2 Y H_{x,y}^{t+1}} + \\
 &\quad + \tau \frac{H_{x-1/2,y}^t U_{x-1/2,y}^t V_{x-1/2,y}^t - H_{x+1/2,y}^t U_{x+1/2,y}^t V_{x+1/2,y}^t}{X H_{x,y}^{t+1}} + \frac{H_{x,y}^t V_{x,y}^t}{H_{x,y}^{t+1}},
 \end{aligned}$$

где  $\tau$  — шаг по времени;  $X$  и  $Y$  — шаги по пространству;  $H$  — глубина жидкости;  $U$  — скорость в направлении  $x$ ;  $V$  — скорость в направлении  $y$ . Нижние индексы  $x, y$  — значения функции, отнесенные к центру масс ячейки с номером  $(x, y)$ . Полуцелые индексы  $x \pm 1/2$ ,  $y \pm 1/2$  — значения величин на границе между ячейками с номерами  $x$ ,  $x \pm 1$ , и  $y$ ,  $y \pm 1$  соответственно. Верхний индекс  $t$  обозначает номер шага по времени.

Следует обратить внимание, что применение кусочно-постоянной сетки, очевидно, привело к исчезновению из разностной схемы (28) слагаемых, отвечающих за изменение геометрии как подстилающей поверхности, так и фиктивной границы. Каждая заданная грань ячейки расчетной области состоит в общем случае из части, аппроксимирующей эффективную границу, и оставшейся части, через которую осуществляется свободное течение жидкости. Формально, с точки зрения приближения мелкой воды первая часть отсутству-

ет, хотя для исходных уравнений Эйлера она фактически является подстилающей поверхностью — границей, на которой выполнено условие непротекания. При выводе уравнений мелкой воды граничное условие на ней учитывается в самом уравнении, что, очевидно, не изменяет природу ее взаимодействия с потоком жидкости. Поэтому члены, отвечающие в разностной схеме за «работу», имеют вид:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \frac{g \left( H_{x-1/2,y}^t + i \left( (B_{x,y} - B_{x-1,y}) + (K_{x,y} + K_{x-1,y})/2 \right) \right)^2}{2}, \\
 A_2 &= \frac{g \left( H_{x+1/2,y}^t + i \left( (B_{x+1,y} - B_{x,y}) + (K_{x+1,y} + K_{x,y})/2 \right) \right)^2}{2}, \\
 A_3 &= \frac{g \left( H_{x,y-1/2}^t + i \left( (B_{x,y} - B_{x,y-1}) + (K_{x,y} + K_{x,y-1})/2 \right) \right)^2}{2}, \\
 A_4 &= \frac{g \left( H_{x,y+1/2}^t + i \left( (B_{x,y+1} - B_{x,y}) + (K_{x,y+1} + K_{x,y})/2 \right) \right)^2}{2},
 \end{aligned} \tag{29}$$

где слагаемые

$$\begin{aligned}
 &i \left( (B_{x,y} - B_{x-1,y}) + (K_{x,y} + K_{x-1,y})/2 \right), \\
 &i \left( (B_{x+1,y} - B_{x,y}) + (K_{x+1,y} + K_{x,y})/2 \right), \\
 &i \left( (B_{x,y} - B_{x,y-1}) + (K_{x,y} + K_{x,y-1})/2 \right), \\
 &i \left( (B_{x,y+1} - B_{x,y}) + (K_{x,y+1} + K_{x,y})/2 \right)
 \end{aligned}$$

описывают «работу» перепада высот эффективной поверхности над потоком жидкости. Здесь переменная  $i$  принимает значение либо 0 (в случае отрицательного перепада высот эффективной поверхности), либо  $0 \leq i \leq 1$  (при положительном перепаде) и принимает значение, равное 1, в случае если  $H^*$ , определяемое при решении задачи Римана над ступенчатой границей с помощью квазидвухслойной модели мелкой воды (Карельский и др., 2004, 2006; Славин и др., 2004; Славин, 2005а, б; Славин и др., 2005; Славин, 2006; Karelsky et al., 2006, 2007а, б, 2005) для соответствующей грани ячейки  $(x, y)$ , не превышает значения глубины внутри нее. В противном случае значение  $i$  на рассматриваемой грани является отношением глубины, формирующейся при полном торможении потока  $(H_{x,y}^t, U_{x,y}^t, V_{x,y}^t)$  на указанной грани, к соответствующему перепаду высот эффективной поверхности. Значения  $H_{x\pm 1/2,y\pm 1/2}^t, U_{x\pm 1/2,y\pm 1/2}^t, V_{x\pm 1/2,y\pm 1/2}^t$  на гранях вычисляются путем решения соответствующих задач Римана.

Если перепад эффективных высот отсутствует, глубины  $H_{x\pm 1/2,y}^t, H_{x,y\pm 1/2}^t$  и скорости  $U_{x\pm 1/2,y}^t, V_{x,y\pm 1/2}^t$  жидкости вычисляются ре-

шением обычной задачи Римана на ровной плоскости и соответственно  $i\left(\left(B_{x,y} - B_{x-1,y}\right) + \left(K_{x,y} + K_{x-1,y}\right)/2\right)$ ,  $i\left(\left(B_{x+1,y} - B_{x,y}\right) + \left(K_{x+1,y} + K_{x,y}\right)/2\right)$ ,  $i\left(\left(B_{x,y} - B_{x,y-1}\right) + \left(K_{x,y} + K_{x,y-1}\right)/2\right)$ ,  $i\left(\left(B_{x,y+1} - B_{x,y}\right) + \left(K_{x,y+1} + K_{x,y}\right)/2\right)$  принимают нулевые значения, и выражения (29), а вместе с ними и вся разностная схема (28) тождественно переходят в стандартную разностную схему Годунова для классических уравнений мелкой воды над ровным дном.

Для демонстрации эффективности численного метода выполнено моделирование течения мелкой воды под влиянием силы Кориолиса над подстилающей поверхностью в виде горы. Характерные параметры задачи: линейные размеры  $10^6 \times 10^6$  м, высота горы  $1,2 \cdot 10^3$  м, глубина жидкости  $2 \cdot 10^3$  м, параметр Кориолиса  $0,00001452 \text{ с}^{-1}$ . Начальные параметры ветра:  $u = 0 \text{ м/с}$ ,  $v = 20 \text{ м/с}$ . Граничные условия — протекание. Использовалась прямоугольная сетка размером  $60 \times 60$  ячеек.

В результате было получено характерное время одного оборота системы, в целом равное 25 ч, что с достаточной точностью соответствует природному феномену (характерное время одного оборота системы в целом для задач геофизической динамики составляет сутки (Должанский, 2006)). На рис. 13 изображена картина течения в начальный момент времени, на рис. 14 — эволюция течения за 25 ч.

### 7. ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ НАД ПРОИЗВОЛЬНЫМ ПРОФИЛЕМ ДНА В ПРИСУТСТВИИ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ

Разработанный для описания силы Кориолиса в течениях вращающейся мелкой воды над неоднородными подстилающими поверхностями численный метод был обобщен на случай произвольной внешней силы. Запишем в дивергентном виде уравнения мелкой воды для течений жидкости или газа с учетом внешней силы над неоднородной поверхностью заданного профиля в двумерном случае (Stoker, 1957; Vreugdenhil, 1994):

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial huv}{\partial y} = -gh \frac{db}{dx} + Eh, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial hvu}{\partial x} = -gh \frac{db}{dy} + Eh, \end{cases} \quad (30)$$

где  $h(x, y, t)$  — глубина жидкости;  $u(x, y, t)$  — осредненная по глубине горизонтальная компонента скорости в направлении  $x$ ;  $v(x, y, t)$  — осредненная по глубине го-

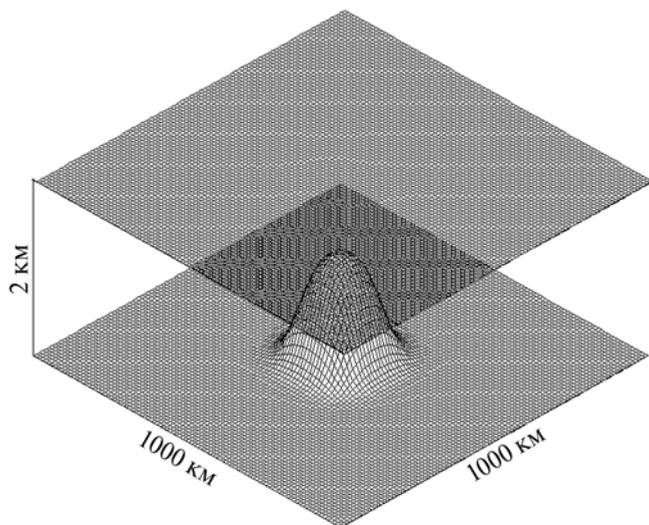


Рис. 13. Начальные условия тестовой задачи

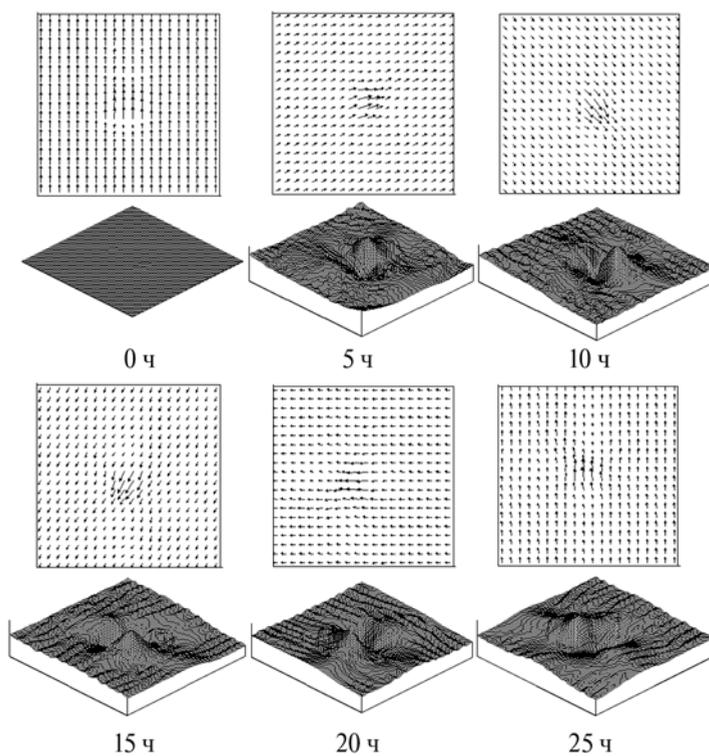


Рис. 14. Эволюция течения жидкости/газа под влиянием силы Кориолиса над горой; верхние графики — поля скоростей, нижние — свободная поверхность

ризонгальная компонента скорости в направлении  $y$ ;  $b(x, y)$  — функция, задающая рельеф дна;  $E = E(h, u, v, x, y, t)$  — внешняя сила;  $g$  — ускорение свободного падения. Первое уравнение в системе (30) является законом сохранения массы, второе и третье — законами сохранения импульса для соответствующих компонент вектора скорости.

Соответствующая одномерная задача, получаемая редукцией системы (30) по одной из пространственных координат с точностью до проекции уравнения импульсов на нередуцированное пространственное направление, соответствует одномерной задаче уравнений мелкой воды над нестационарной комплексной подстилающей поверхностью. Пренебрегая в (30) производными для определенности, например, по  $y$ , получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} = -gh \frac{db}{dx} + Eh. \end{cases} \quad (31)$$

Здесь  $u = u(x, t)$ ,  $b = b(x, t)$  и  $E = E(h, u, v, x, t)$ . Если проекция внешней силы  $E_x$  на одну из координатных линий зависит от полного вектора либо от проекции вектора скорости на другую координатную линию, задача становится существенно двумерной. Тогда отказ от производных по одной из пространственных переменных может приводить к нарушению закона сохранения импульса, что, в свою очередь, может потребовать либо введения некоторой фиктивной работы для компенсации указанных нарушений, несмотря на всю нефизичность такой компенсации, либо уточнения трансверсальной составляющей вектора скорости с учетом вертикальной неоднородности течения. Такая ситуация складывается, например, при моделировании вращающейся мелкой воды, когда в качестве внешней силы выступает сила Кориолиса. Использование квазидвухслойной модели позволяет уточнить трансверсальную составляющую вектора скорости в предположении ее стационарности на каждом временном шаге, что, в частности, приводит к улучшению сохранения вектора потенциальной зависимости. Если  $E$  зависит только от  $h$ ,  $u$  и  $t$ , тогда расщепление системы (30) на набор подсистем (31) физически обоснованно. В противном случае нужно пересчитывать трансверсальную составляющую скорости, как это было описано в разд. 2.

Как и в случае с силой Кориолиса, решение задачи под влиянием внешней силы сводится к решению задачи о течениях мелкой воды над комплексной нестационарной подстилающей поверхностью. Для получения формального совпадения вида уравнений представим его как

$$g \frac{dk}{dx} = -E, \quad (32)$$

где  $k = k(x, t)$  — фиктивная подстилающая поверхность. Тогда система (31) перепишется в виде

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} = -gh \frac{d(b+k)}{dx}. \end{cases} \quad (33)$$

Как нетрудно видеть, такое представление существенно сужает класс возможных решений, исключая из рассмотрения пространственно-неинтегрируемые функции, задающие внешнюю силу  $E$ .

Если ввести разностную сетку с пространственным шагом  $X$  в направлении  $x$  и рассмотреть две соседние ячейки по  $x$ , то согласно формуле (32) после усреднения в левой ячейке будем иметь фиктивную подстилающую поверхность высоты  $E_l X/g$  и  $E_r X/g$  — в правой ячейке. Следовательно, разница средних высот фиктивной поверхности на границе двух соседних ячеек будет определяться выражением

$$K_E = \frac{|E_r X/g + E_l X/g|}{2}. \quad (34)$$

Для проверки эффективности предложенного метода был решен ряд модельных задач, соответствующих различным видам неоднородностей подстилающей поверхности и нескольким типам внешних сил. В частности, в качестве подстилающих поверхностей использовались горизонтальные и наклонные плоскости и поверхность параболического типа. Для моделирования внешних сил использовались сила Кориолиса и сила гидравлического трения. Результаты численного моделирования сравнивались с данными лабораторных экспериментов.

#### ***А. Задача о распаде прямоугольного столба жидкости на наклонной плоскости***

В центре бесконечной плоскости, расположенной под некоторым углом наклона к горизонту  $k$ , находится столб жидкости, имеющий форму параллелепипеда. Таким образом рассматривается влияние постоянной внешней силы, равной

$$E = -gk. \quad (35)$$

Уравнения Сен-Венана для случая наклонной плоскости:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial huv}{\partial y} = -gkh, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial hvu}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (36)$$

Результаты численного расчета представлены в работе (Karelsky et al., 2007). Была выявлена практически полная аналогия между результатами, полученными с помощью квазидвухслойного метода, и расчетом, использующим замену переменных, что свидетельствует об эффективности применения модели при описании таких физических явлений.

**Б. Течение вращающейся жидкости над горой параболического профиля**

Решена задача, содержащая как неоднородную поверхность, так и внешнюю силу — силу Кориолиса. Уравнения мелкой воды в данном случае выглядят следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial h u v}{\partial y} = -gh \frac{db}{dx} + f v h, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial h v u}{\partial x} = -gh \frac{db}{dy} - f u h. \end{cases} \quad (37)$$

где  $f$  — параметр Кориолиса. Согласно (30) получаем внешние силы:  $E_x = fv$  и  $E_y = -fu$ . Результаты этого численного расчета представлены в разд. 6.

**В. Задача о разрушении двумерной дамбы с учетом гидравлического трения**

Расчетная область представляет собой прямоугольник размерами  $3 \times 2$  м, ограниченный с трех сторон непротекаемыми стенками. На расстоянии 1 м от левой непротекаемой границы имеется перегородка с симметричным относительно оси абсцисс отверстием шириной 0,4 м. Толщина перегородки пренебрежимо мала и в расчет не принимается. В начальный момент времени отверстие в перегородке закрыто и вся жидкость располагается слева от нее. Через правую границу расчетной области жидкость может свободно протекать. Использована декартова система координат, такая, что перегородка принадлежит оси ординат, а ось абсцисс делит расчетную область на две симметричные половины и начало координат совпадает с центром отверстия в перегородке. Все параметры проведенного численного эксперимента взяты в соответствии с условиями лабораторных и численных экспериментов (Fraccarollo, Toro, 1995). В проведенных численных и лабораторных экспериментах угол наклона подстилающей поверхности варьировался от 0 до 10 %. Координаты контрольных точек и схема их расположения приведены на рис. 15. Лабораторная установка выполнена из плексигласа и снабжена механизмом для открывания заслонки отверстия в перегородке со скоростью, достаточной для того, чтобы динамика

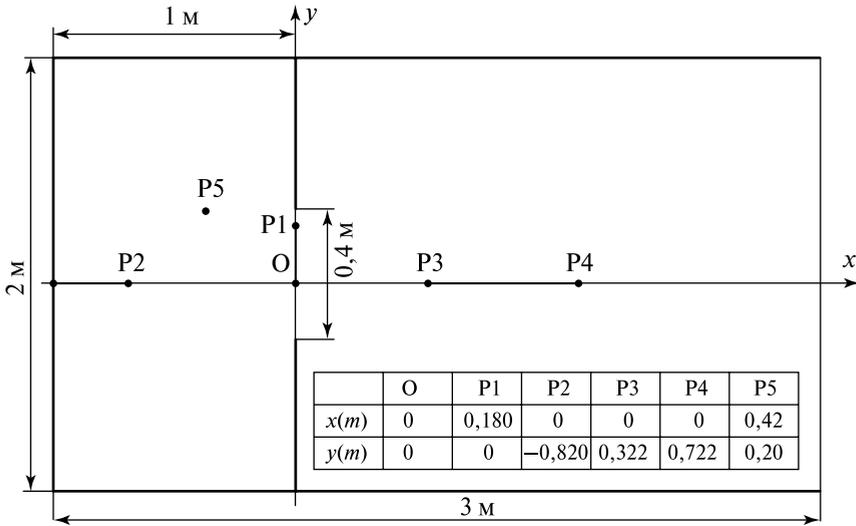


Рис. 15. Схема расчетной области и расположения контрольных точек двумерного распада разрыва

подъема заслонки не отразилась на картине формируемого течения. Подробное описание лабораторной установки и проведенных экспериментов содержится в статье (Fraccarollo, Toro, 1995).

Уравнения мелкой воды в данном случае имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial(huv)}{\partial y} = -gh \frac{db}{dx} + \frac{1}{2} \lambda u |u| h, \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} + \frac{\partial(hvu)}{\partial x} = -gh \frac{db}{dy} + \frac{1}{2} \lambda v |v| h, \end{cases} \quad (38)$$

где  $\lambda = 2gn^2h^{-4/3}$ ,  $n = 0,007$ . Для системы (38) имеем внешнюю силу в виде:  $E_x = \frac{1}{2} \lambda u |u|$ ,  $E_y = h \frac{1}{2} \lambda v |v|$ .

Ниже приведены результаты для случая горизонтальной и наклонной подстилающих поверхностей, угол наклона последней составляет  $6,3^\circ$ . В начальный момент времени глубина жидкости слева от перегородки составляла 0,6 м, жидкость покоилась для всех приводимых ниже результатов. Расчетная область разбивалась на ячейки сеткой  $150 \times 50$ .

На рис. 16 приведены графики изменения глубины и скорости жидкости в точке 0, соответствующей центру разрушающейся дамбы. Левый график соответствует глубине жидкости, правый — скорости. Пунктирная линия соответствует

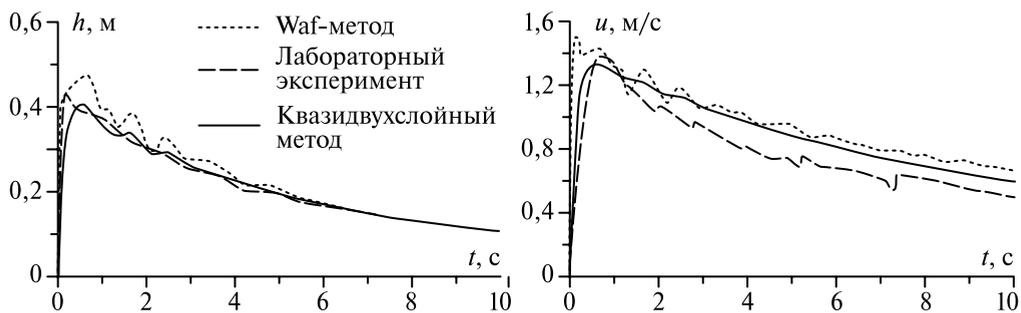


Рис. 16. Зависимость от времени глубины жидкости (слева) и скорости жидкости (справа) в направлении  $x$  в т. 0

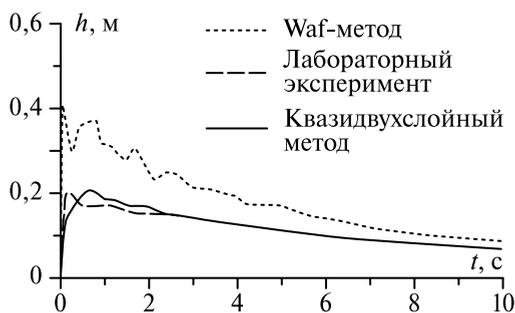


Рис. 17. Зависимость от времени глубины жидкости в т. P1

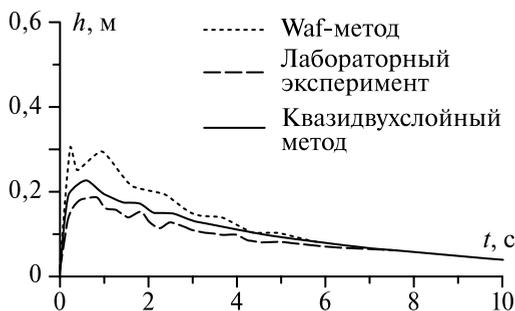


Рис. 18. Зависимость от времени глубины жидкости в т. P3

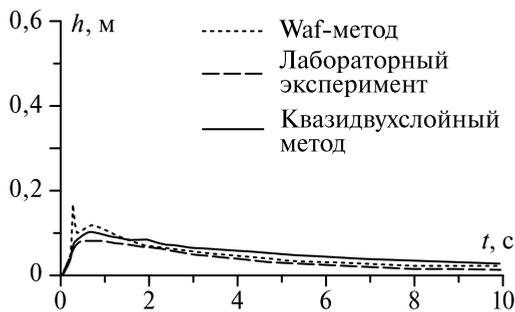
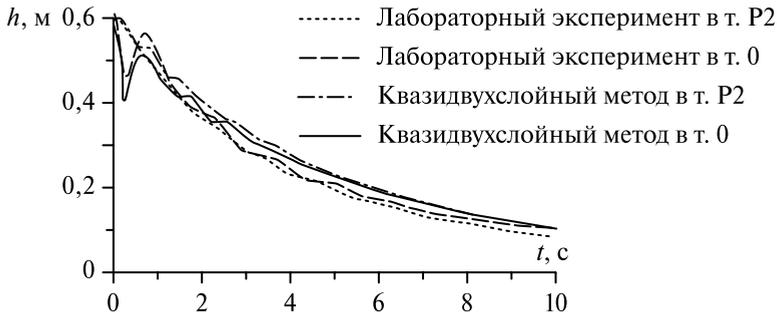


Рис. 19. Зависимость от времени глубины жидкости в т. P4



**Рис. 20.** Зависимость от времени глубины жидкости в эксперименте с наклонной подстилающей поверхностью по результатам лабораторных измерений и вычислений квазидвухслойным методом

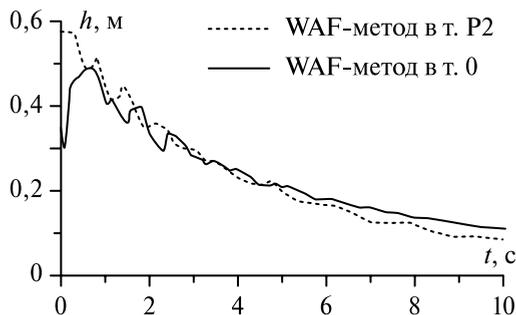
измерениям, полученным в лабораторном эксперименте (*Fraccarollo, Toro, 1995*), точечная линия — модельным вычислениям на основе WAF-метода (*Fraccarollo, Toro, 1995*), черная линия — результатам расчетов, полученных предлагаемым квазидвухслойным методом.

На рис. 17–19 приведена динамика глубины жидкости для горизонтальной подстилающей поверхности в четырех контрольных точках.

На рис. 20 приведена динамика глубины жидкости над наклонной подстилающей поверхностью в двух контрольных точках — 0 и P2.

На рис. 21 приведены результаты расчетов WAF-методом для тех же точек. Отчетливо видно, что данные, полученные предлагаемым квазидвухслойным методом, хорошо согласуются с экспериментальными данными, при этом увеличивается точность расчетов по сравнению с результатами, полученными в работе (*Fraccarollo, Toro, 1995*) WAF-методом.

На рис. 22 приведена динамика скорости жидкости в направлении  $x$  в контрольной точке P5, полученная экспериментально, а также численно на основе WAF-метода (*Fraccarollo, Toro, 1995*) и с помощью предлагаемого квазидвухслойного метода.



**Рис. 21.** Зависимость от времени глубины жидкости в эксперименте с наклонной подстилающей поверхностью по результатам вычислений WAF-методом

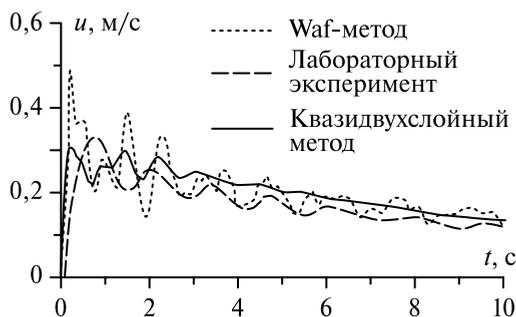


Рис. 22. Зависимость от времени скорости жидкости в направлении  $x$  в т. P5

### Выводы

В работе предложена конечно-разностная модель, позволяющая описать силу Кориолиса в численных методах годуновского типа для течений вращающейся мелкой воды. На основе предложенного представления разработан конечно-объемный алгоритм как для ровной границы, так и для границы произвольного вида. Метод основан на представлении произвольной подстилающей поверхности и силы Кориолиса комплексной нестационарной ступенчатой границей. Обсуждены границы применимости данного представления с точки зрения конечно-объемных численных методов. Конечно-разностная аппроксимация эффективной комплексной нестационарной поверхности осуществлена на основе квазидвухслойной модели мелкой воды, являющейся более точной по отношению к исходной системе уравнений Эйлера по сравнению с классическими однослойными моделями. Предложенное представление адекватно описывает особенности нелинейных процессов, вызванные силой Кориолиса в численных методах годуновского типа, поскольку корректно отражает нелинейную структуру течений вблизи особенностей, возникающих после дискретизации эффективной границы. На основе проведенного сравнительного анализа показано, что хорошо известные численные модели являются частным случаем реализованного квазидвухслойного метода. Заметим, что для реализации идеи квазидвухслойного метода можно использовать не только точные решения задачи Римана для уравнений мелкой воды, но и другие приближенные решения этой задачи, как, например, это сделано в методе Роу (Roe, 1981), Хартена-Лакса ван Лира (Harten, 1983), WAF-методе (Toro, 1999) и в методе Энгквиста – Ошера (Engquist, 1981). Выявлено основное преимущество предлагаемого метода, позволяющее точнее описывать трансверсальную составляющую вектора скорости и тем самым минимизировать погрешность вычислений, индуцированных существенной двумерностью постановок задач для вращающейся жидкости. Реализации указанного преимущества будет посвящена отдельная статья.

Эффективность метода подтверждена проведенным численным экспериментом по моделированию классической задачи геострофической адаптации, известной как задача Россби, и расчетом вращающейся мелкой воды над

подстилающей поверхностью параболического профиля. Достоверность результатов показана на основе решения задачи о разрушении двумерной дамбы и сравнения полученных решений с результатами имеющихся лабораторных экспериментов.

### *Литература*

- Беликов В. В., Семенов А. Ю.* Численный метод распада разрыва для решения уравнений теории мелкой воды // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1997. Т. 37. № 8. С. 1006–1019.
- Вольцингер Н. Е., Пясковский Р. В.* Теория мелкой воды. Океанологические задачи и численные методы. Л.: Гидрометеиздат, 1977.
- Должанский Ф. В.* Лекции по геофизической гидродинамике. М.: ИВМ РАН, 2006. ISBN 5-901854-08-X.
- Карельский К. В., Петросян А. С., Славин А. Г.* Трансформация разрыва для потоков мелкой воды на скачке // Сб. тр. Международ. конф. МСС-04 «Трансформация волн, когерентные структуры и турбулентность». М., 2004. С. 111–116.
- Карельский К. В., Петросян А. С., Славин А. Г.* Численное моделирование гидродинамических течений над произвольным профилем дна в рамках приближения квазидвухслойной мелкой воды: Препринт. Пр-2115. М.: ИКИ РАН, 2006. С. 51.
- Колган В. П.* Применение операторов сглаживания в разностных схемах высокого порядка точности // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1978. Т. 18. № 5. С. 1340–1345.
- Крукиер Л. А., Муратова Г. В.* Использование метода конечных разностей для решений уравнений мелкой воды // Журн. мат. моделирования. 2001. Т. 13. № 3. С. 57–60.
- Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю.* Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001.
- Обухов А. М.* К вопросу о геострофическом ветре // Изв. АН СССР. Сер. геофиз. географ. 1949. Т. 13. № 4. С. 281–306.
- Славин А. Г.* Гидродинамика невязкой тяжелой жидкости со свободной поверхностью над подстилающей поверхностью сложного профиля // Тр. 28-й Конф. молодых ученых мех.-мат. ф-та МГУ им. М. В. Ломоносова. М., 2006. С. 188–192.
- Славин А. Г.* Квазидвухслойная модель для потоков мелкой воды над ступенькой // Тр. 27-й Конф. молодых ученых мех.-мат. ф-та МГУ им. М. В. Ломоносова. М., 2005б. С. 110–116.
- Славин А. Г.* Конечно-разностное представление силы Кориолиса в численных моделях годуновского типа для течений вращающейся мелкой воды // Тр. 30-й Конф. молодых ученых мех.-мат. ф-та МГУ им. М. В. Ломоносова. М., 2008б.

- Славин А. Г.* Моделирование течений вращающейся мелкой воды методом Годуновского типа, основанным на квазидвухслойном представлении // 5-я Конф. молодых ученых, посвященная Дню космонавтики: Тез. докл. М.: ИКИ РАН, 2008а. С. 40.
- Славин А. Г.* Модель обтекания жидкостью ступенчатой границы в приближении «мелкой воды» // 2-я Конф. молодых ученых, посвященная Дню космонавтики: Тез. докл. М.: ИКИ РАН, 2005а. С. 19.
- Славин А. Г., Карельский К. В., Петросян А. С.* Квазидвухслойная модель для потоков мелкой воды над ступенчатой границей // Тр. 47-й Науч. конф. МФТИ. Ч. 8. Физика и энергетика. М., 2004. С. 30–32.
- Славин А. Г., Карельский К. В., Петросян А. С.* Моделирование течений невязкой тяжелой жидкости со свободной поверхностью // Тр. 47-й Науч. конф. МФТИ. Ч. 8. Современ. проблемы фундаментальных и прикладных наук. М., 2005. С. 52–55.
- Alcrudo F., Benkhalidoun F.* Exact solutions to the Riemann problem of the shallow water equations with a bottom step // Computational Fluids. 2001. V. 30. P. 643–671.
- Alcrudo F., Garcia-Navarro P.* A high resolution Godunov-type scheme in finite volumes for the 2D shallow water equation // Intern. J. Numer. Meth. Fluids 1993. Nr. 16. P. 489–505.
- Audusse E., Bouchut F., Bristeau M.-O, Klein R., Perthame B.* A Fast and Stable Well-Balanced Scheme with Hydrostatic Reconstruction for Shallow Water Flows // SIAM J. Sci. Comp. 2004. Nr. 25. Iss. 6. P. 2050–2065.
- Audusse E., Bristeau F.* A well-balanced positivity preserving «second-order» scheme for shallow water flows on unstructured meshes // J. Computational Physics. 2005. Nr. 206. P. 311–333.
- Benkhalidoun F., Elmahi I., Seaid M.* Well-balanced finite volume schemes for pollutant transport by shallow water equations on unstructured meshes // J. Computational Physics. 2007. Nr. 226. P. 180–203.
- Bermudez A., Vazquez M. E.* Upwind methods for hyperbolic conservation laws with source terms // Computational Fluids. 1994. V. 23. Nr. 8. P. 1049–1071.
- Bernetti R., Titarev V. A., Toro E. F.* Exact solution of the Riemann problem for the shallow water equations with discontinuous bottom geometry // J. Computational Phys. 2007. doi: 10.1016/j.jcp. 2007.11.033.
- Blumen W.* Geostrophic adjustment // Geophys. Space Phys. 1972. V. 10. P. 485–528.
- Bouchut F., Sommer J. Le, Zeitlin V.* Frontal geostrophic adjustment and nonlinear-wave phenomena in one dimensional rotating shallow water. Pt. 2: High-resolution numerical simulations // J. Fluid Mechanics. 2004. Nr. 514. P. 35–63.
- Cahn A.* An investigation of a free oscillations of a simple current system // J. Meteor. 1945. V. 2. P. 113–119.
- Caleffi V., Valiani A., Bernini A.* Fourth-order balanced source term treatment in central WENO schemes for shallow water equations // J. Computational Physics. 2006. Nr. 218. P. 228–245.
- Castro M., Gallardo J. M., Pares C.* High order finite volume schemes based on reconstruction of states for solving hyperbolic systems with nonconservative products.

- Applications to shallow water systems // *Math. Computational*. 2006. V. 75. P. 1103–1134.
- Castro M. J., Garcia J. A., Gonzalez-Vida J. M., Macias J., Pares C., Vazquez-Cendon M. E.* Numerical simulation of two-layer shallow water flows through channels with irregular geometry // *J. Computational Physics*. 2004. V. 195. P. 202–235.
- Cea L., Vazquez-Cendon M. E., Puertas J.* Depth Averaged Modelling of Turbulent Shallow Water Flow with Wet-Dry Fronts // *Arch. Computational Methods Eng.* 2007. Nr. 14. P. 303–341.
- Cea L., Vazquez-Cendon M. E., Puertas J., Pena L.* Numerical treatment of turbulent and mass source terms in the shallow water equations for channels with irregular section // *European Congr. on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS)*. 2004.
- Chapman S., Cowling T. G.* The mathematical theory of non-uniform gases. Cambridge Univ. Press: Cambridge, 1952.
- Charney J. G., Fjortoft R., Neumann J. Von.* Numerical integration of the barotropic vorticity equation // *Tellus*. 1950. Nr. 2. P. 237–254.
- Engquist B., Osher S.* One-sided difference approximations for nonlinear conservation laws // *Math. Computational*. 1981. V. 36. Nr. 154. P. 321–351.
- Fraccarollo L., Toro E. F.* Experimental and numerical assessment of the shallow water model for two-dimensional dam-break type problems // *J. Hydraulic Research*. 1995. V. 33. Nr. 6. P. 843–864.
- Gallouet T., Herard J. M., Seguin N.* Some approximate Godunov schemes to compute shallow-water equations with topography // *Computational Fluids*. 2003. Nr. 32. P. 479–513.
- George D. L.* Augmented Riemann Solvers for the Shallow Water Equations over Variable Topography with Steady States and Inundation // *J. Computational Physics*. 2007. doi: 10.1016/j.jcp. 2007.10.027.
- George D. L.* Finite volume methods and adaptive refinement for tsunami propagation and inundation. PhD thesis. University of Washington, 2006.
- Gill A. E.* Atmosphere-Ocean Dynamics. Academic Press: San Diego, CA, 1982, 662 p.
- Gosse L.* A well-balanced flux-vector splitting scheme designed for hyperbolic systems of conservation laws with source terms // *Computational Math. Appl.* 2000. Nr. 39. P. 135–159.
- Greenberg J. M., Leroux A.-Y.* A well-balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations // *SIAM J. Numer. Anal.* 1996. Nr. 33. P. 1–16.
- Guinot V.* An approximate two-dimensional Riemann solver for hyperbolic systems of conservation laws // *J. Computational Physics*. 2005. Nr. 205. P. 292–314.
- Harten A., Lax P. D., Leer B. Van.* On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws // *SIAM Rev.* 1983. V. 21. Nr. 1. P. 35–61.
- Hu K., Mingham C. G., Causon D. M.* Numerical simulation of wave overtopping of coastal structures using the non-linear shallow water equations // *Coastal Engineering*. 2000. Nr. 41. P. 433–465.

- Hubbard M. E., Garcia-Navarro P.* Flux difference splitting and the balancing of source terms and flux gradients // *J. Computational Physics*. 2001. Nr. 165. P. 89–125.
- Karelsky K. V., Petrosyan A. S., Slavin A. G.* Numerical simulation of flows of a heavy nonviscous fluid with a free surface in the gravity field over a bed surface with an arbitrary profile // *Russian j. of Numerical Analysis and Mathematical modeling*. 2007a. V. 22. Nr. 6. P. 543–565.
- Karelsky K. V., Petrosyan A. S., Slavin A. G.* Quasi-two-layer model for numerical analysis of shallow water flows over a step boundary // *5-th Intern. Symp. on Environmental Hydraulics*. Arizona, 2007b.
- Karelsky K. V., Petrosyan A. S., Slavin A. G.* Quazi-two-layer model for numerical analysis shallow water flows on step // *Russian journal of Numerical Analysis and Mathematical modeling*. 2006. V. 21. Nr. 6. P. 539–559.
- Karelsky K. V., Petrosyan A. S., Slavin A. G.* Riemann problem for shallow water flows on step // *Geophysical Research Abstracts*. V. 7. 08202. Vienna, Austria, 2005.
- Kirwan-Jr A. D., Juping L.* The Shallow-Water Equations on an F-Plane // *Proc. Intern. school of physics „Enrico Fermi“*. Nonlinear Topics in Ocean Physics. 1988.
- Kirwan-Jr A. D., Mied R. P., Lipphardt-Jr B. L.* Rotating modons over isolated topography in a two-layer ocean // *J. Angew. Math. Phys*. 1997. Nr. 48. P. 535–570.
- Kizner Z., Khvoles R., McWilliams J. C.* Rotating multipoles on the f and  $-$  planes // *Physics of Fluids*. 2007. Nr. 19. P. 016603.
- Kuo A. C., Polvani L. M.* Time-dependent fully nonlinear geostrophic adjustment // *J. Phys. Oceanogr*. 1997. Nr. 27. P. 1614–1634.
- Le Veque R. J.* Balancing source terms and flux gradients in high-resolution Godunov methods: the quasi-steady wave-propagation algorithm // *J. Computational Physics*. 1998a. Nr. 146. P. 346–365.
- Le Veque R. J.* Wave-propagation algorithms for multidimensional hyperbolic systems // *J. Computational Physics*. 1998b. Nr. 131. P. 327–353.
- Pares C., Castro M.* On the well-balanced property of Roe’s method for nonconservative hyperbolic systems // *Applications to shallow water systems, ESAIM: M2AN* 38. 2004. P. 821–852.
- Pedlosky J.* *Waves in the Ocean and Atmosphere. Introduction to Wave Dynamics*. Springer-Verlag: Berlin, 2003. V. 260. ISBN 3-540-00340-1.
- Reznik G. M., Zeitlin V., Ben Jelloul M.* Nonlinear theory of geostrophic adjustment. Part 1. Rotating shallow-water model // *J. Fluid Mechanics*. 2001. V. 445. P. 93–120.
- Roe P. L.* Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes // *J. Computational Physics*. 1981. Nr. 43. P. 357–372.
- Rosby C. G.* On the mutual adjustment of pressure and velocity distributions in certain simple current systems // *J. Mar. Res.* 1. 1938. P. 239–263.
- Sommer J. Le, Medvedev S. B., Plougonven R., Zeitlin V.* Singularity formation during relaxation of jets and fronts toward the state of geostrophic equilibrium // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. V. 8. Nr. 3. Sept. 2003. P. 415–442.

- Stoker J. J.* Water Waves: The Mathematical Theory with Applications. N. Y.: Interscience, 1957.
- Toro E. F.* Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction. 2nd ed. Springer-Verlag: Berlin, 1999.
- Vazquez-Cendon M. E.* Improved treatment of source terms in upwind schemes for the shallow water equations in channels with irregular geometry // *J. Computational Physics*. 1999. Nr. 148. P. 497–526.
- Vignoli G., Titarev V. A., Toro E. F.* ADER schemes for the shallow water equations in channel with irregular bottom elevation // *J. Computational Physics*. 2007. doi: 10.1016/j.jcp.2007.11.006.
- Vreugdenhil C. B.* Numerical methods for shallow-water flow. Dordrecht, Netherlands: Kluwer, 1994.
- Zhou J. G., Causon D. M., Mingham C. G., Ingram D. M.* The surface gradient method for the treatment of source terms in the shallow water equations // *J. Computational Physics*. 2001. Nr. 168. P. 1–25.
- Zoppou C., Roberts S.* Numerical solution of the two-dimensional unsteady dam break // *Appl. Math. Model.* 24. 2000. P. 457–475.

## NUMERICAL SIMULATION OF ROTATING SHALLOW WATER FLOWS

**К. В. Karelsky, A. S. Petrosyan, A. G. Slavin**

*Space Research Institute of the Russian Academy of Science*

In the given work the finite-difference presentation is proposed, that describes the Coriolis force in numerical Godunov-type methods for rotating shallow water flows. The finite-difference schemes are offered for simulating the flows, both on a smooth underlying surface, and for underlying surface of arbitrary profile. The Coriolis force effect is simulated by introducing the fictitious non-stationary boundary. For numerical approximation of source terms, caused by inhomogeneity of underlying surface and Coriolis force effect, the quasi-two-layer model of fluid flow over a stepwise boundary is applied, that takes into account hydrodynamic features. The comparative analysis is performed with known finite-difference schemes describing the rotation and inhomogeneity of a bed profile, and the calculations showing the efficiency of the proposed method are carried out.

## ИСПАРЕНИЕ И ГИДРОДИНАМИКА ЛЕЖАЩЕЙ НА ПОДЛОЖКЕ КАПЛИ КАПИЛЛЯРНОГО РАЗМЕРА

Л. Ю. Бараш, Л. Н. Щур, В. М. Винокур, Т. П. Бигиони

*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук  
E-mail: barash@itp.ac.ru*

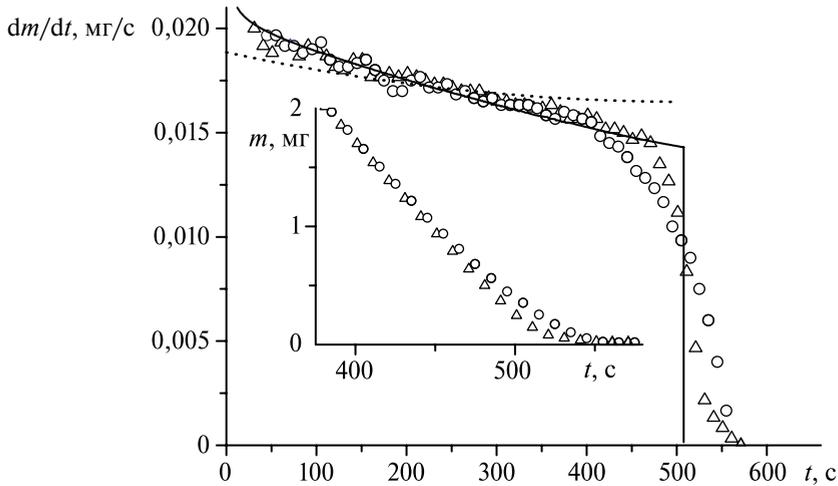
Найдено несколько стадий динамики конвекции Марангони в лежащей на подложке испаряющейся капле, характеризующихся числом вихрей в капле и их пространственным расположением в ней. На ранней стадии образуется слой приповерхностных вихрей, который индуцирует немонотонное пространственное распределение температуры вдоль поверхности капли. Максимальное число приповерхностных вихрей в капле определяется размером ячейки Марангони, вычисляемым по формальной аналогии с плоским жидким слоем. Число вихрей быстро уменьшается со временем, и в промежуточной и недолговременной стадии наблюдается три вихря в объеме капли. Наконец, система эволюционирует к квазистационарному состоянию с одним вихрем, существующим большую часть времени испарения.

В данной работе обсуждается совместный расчет динамики жидкости, диффузии пара и пространственного распределения температуры в капле в течение процесса испарения в режиме пиннинга контактной линии (см. также *Barash* и др., 2009). Учтены конвективные слагаемые и нестационарность в уравнениях Навье – Стокса и теплопроводности. Основные результаты включают динамическое развитие конвекции Марангони в испаряющейся капле и распределение в ней температуры. Вычислена динамика скорости испарения капли и зависимость величины контактного угла от времени. Проведено сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными для капли толуола.

### ДИНАМИКА СКОРОСТИ ИСПАРЕНИЯ КАПЛИ

Скорость испарения лежащих на подложке жидких капель контролируется в основном диффузией пара в окружающей атмосфере (*Deegan* и др., 2000). Мы определили коэффициент диффузии паров толуола в воздухе, используя результаты измерения скорости испарения капли толуола. Основные условия и параметры эксперимента следующие. Капля толуола объемом 10 мкл лежит на подложке и испаряется в атмосферу в течение примерно 500 с в режиме пиннинга контактной линии. Вес капли измеряется каждые 10 с. В качестве подложки в эксперименте была использована кремниевая вафля, покрытая слоем аморфного нитрида кремния толщиной 100 нм.

Результаты измерения скорости испарения капли представлены на рис. 1. Кружки обозначают экспериментальные значения для испарения чистого толуола, открытые треугольники — значения для коллоидного раствора золотых частиц в толуоле, сплошная линия — результат численного расчета скорости



**Рис. 1.** Скорость испарения капли  $dm/dt$ : экспериментальные данные для испарения чистого толуола (кружки) и коллоидного раствора золотых наночастиц в толуоле (треугольники); сплошная линия — результаты численного расчета, полученные в полной схеме расчета для диффузии паров; пунктирная линия получена при упрощающем предположении об однородности локального потока испарения вдоль поверхности капли и его неизменности во времени. Вставка к рисунку: изменение массы на последней стадии испарения

испарения в диффузионной модели. Как видно на рис. 1, численный расчет находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Сравнение экспериментальных данных и результатов численных расчетов позволяет вычислить коэффициент диффузии паров толуола  $D$  — единственный параметр, контролирующий испарение:  $D = 0,1449 \text{ см}^2/\text{с}$ . Это значение примерно в полтора раза меньше, чем данные, полученные при помощи грубой оценки.

Процесс испарения, представленный на рис. 1, можно разделить на три характерных временных интервала. Проведенный численный расчет описывает основной, наиболее длительный интервал испарения, когда оно имеет квазистационарный характер и определяется диффузией паров толуола. Этот интервал длится в течение примерно 400 с. В противоположность хорошему согласию между расчетами и экспериментальными данными в течение медленного диффузионного режима испарения, последующая стадия высыхания капли (последние 50–100 с) качественно отличается от изученного режима. Быстрое падение скорости испарения капли на стадии высыхания контролируется несколькими дополнительными факторами. Основным из них является депининг контактной линии, когда площадь контакта с подложкой уменьшается во времени. Стадию высыхания капли естественно разделить на два временных этапа. Скорость испарения в течение первого этапа, который отвечает временному интервалу  $t = 400\text{--}510$  с на рис. 1, описывается формулой  $dm/dt \propto (t_0 - t)^\alpha$ . Эта формула хорошо аппроксимирует экспериментальные

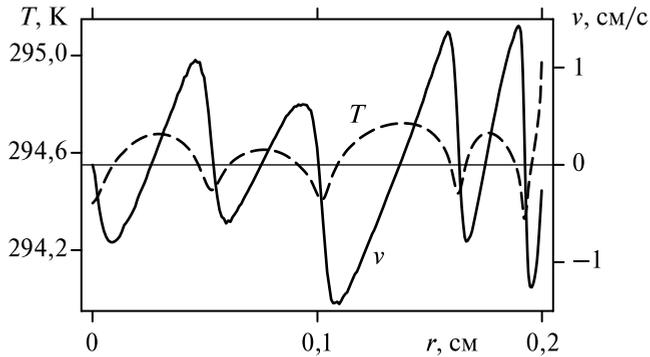
данные при выборе параметров  $t_0 = 550(2)$ ,  $\alpha = 0,41(2)$  для испарения капли чистого толуола и  $t_0 = 522(3)$ ,  $\alpha = 0,28(8)$  для испарения коллоидного раствора. Скорость испарения на последней стадии высыхания затухает экспоненциально:  $dm/dt \propto \exp(-t/t_d)$ , где  $t_d = 20,5(3)$  для испарения коллоидного раствора. Это экспоненциальное поведение связано с тем, что скорость испарения контролируется на этом этапе изменением площади  $A$  контакта с подложкой почти плоской капли:  $dA/dt \propto dm/dt \propto A$ . Вставка на рис. 1 показывает экспериментальную зависимость массы капли от времени в течение стадии высыхания.

## ВИХРЕВОЙ СЛОЙ И ДИНАМИКА ВИХРЕВОЙ СТРУКТУРЫ

Наши расчеты показали наличие характерной ранней стадии динамики конвекции Марангони в испаряющейся лежащей на подложке капле. Для разных жидкостей и капель разного размера вихри в капле первоначально возникают около ее поверхности. Для капли толуола этот режим быстро появляется и эволюционирует в течение первых  $\approx 0,3$  с. Хотя по сравнению с полным временем испарения  $\approx 550$  с это очень короткий временной интервал, данного времени достаточно для возможности экспериментального наблюдения найденных приповерхностных вихрей. Со временем размер вихрей увеличивается, их число уменьшается и в конечном счете конвекция Марангони охватывает объем капли. Слой приповерхностных вихрей изображен на рис. 2 и 3 (см. с. 221), где вихревая структура содержит четыре пары приповерхностных вихрей и угловой вихрь. При этом распределение температуры оказывается немонотонным вдоль поверхности и имеет ровно девять экстремумов. Можно показать, что максимальное число приповерхностных вихрей в капле определяется характерным размером ячейки Марангони, если оценку провести аналогично способу Пирсона, используемому для плоского жидкого слоя (*Pearson, 1958*). Существование приповерхностных вихрей и соответствующих экстремумов в профиле приповерхностной температуры становится более выраженным при уменьшении вязкости жидкости. Приповерхностные вихри исчезают, когда вязкость увеличивается более чем в четыре раза по сравнению с каплей толуола.

Как видно на рис. 2, экстремумы поверхностной температуры соответствуют изменению знака тангенциальной компоненты скорости на поверхности. Дело здесь в том, что жидкость движется на поверхности от более горячих областей к более холодным, поскольку поверхностное натяжение уменьшается с увеличением температуры. Движение жидкости приводит к перераспределению температуры вследствие конвективного переноса тепла.

С увеличением размера приповерхностных вихрей и развитием конвекции в объеме капли на промежуточном этапе возникает состояние с тремя вихрями, которое контролирует распределение скорости и температуры. Это показано на рис. 4а и 5а (см. с. 221) для  $t \approx 0,45$  с. В процессе существования трех вихрей угловой вихрь начинает расти за счет двух других вихрей, и в конечном счете при  $t \approx 2$  с он занимает весь объем капли. Пространственная зависимость температуры вдоль поверхности капли немонотонна, если капля содержит более



**Рис. 2.** Температура и скорость вдоль поверхности капли как функции  $r$  при  $t = 0,16$  с (это соответствует рис. 3)

одного вихря (см. рис. 5). На рис. 4б и 5б показано, что в режиме одного вихря силы Марангони вызывают движение жидкости вдоль поверхности к вершине капли, где далее жидкость движется вдоль оси симметрии в глубину капли.

Конвекция с одним объемным вихрем представляет собой одну из основных стадий конвективной динамики жидкости в испаряющейся капле. В течение этого периода, который длится до  $t \approx 250$  с, испаряется более половины массы капли. Для начальных значений массы, высоты и контактного угла капли, равных  $m = 8,7$  мг,  $h = 0,314$  см,  $\theta = 1,2045$ , для момента  $t = 250$  с находим  $m = 4,0$  мг,  $h = 0,0685$  см,  $\theta = 0,716$ . При этом, в частности,  $h/(2r_0) \approx 0,17$ , т. е. форма капли становится заметно более сплюснутой. Для полного времени испарения требуется 508 с.

Квазистационарное состояние с одним вихрем теряет свою устойчивость при  $t \approx 250$  с. При этом вихрь приобретает выраженный нестационарный характер в связи с возникающими пульсациями движения жидкости. Характерный период пульсаций совпадает с периодом циркуляции элемента жидкости в исходном вихре и равен 0,15 с. Пульсация возникает сначала вблизи центра исходного вихря, а затем, как показано на рис. 6, структура пульсаций усложняется: одна ячейка пульсаций заменяется на две, а затем на три ячейки. В конечном счете при  $t \approx 300$  с возникает квазистационарное состояние с тремя вихрями.

Численные расчеты динамики жидкости тестировались на сетках разного размера. Соответствующие результаты качественно совпали и показали надежную сходимость количественных результатов. Например, режим конвекции с одним вихрем возникает при 3,48; 2,48; 2,2; 2,06; 2,01 с для сеток  $100 \times 100$ ,  $150 \times 150$ ,  $200 \times 200$ ,  $250 \times 250$ ,  $300 \times 300$ , покрывающих половину меридионального сечения капли.

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ В КАПЛЕ

Если теплопроводность подложки велика по сравнению с теплопроводностью жидкости, то температура на поверхности подложки оказывается практически

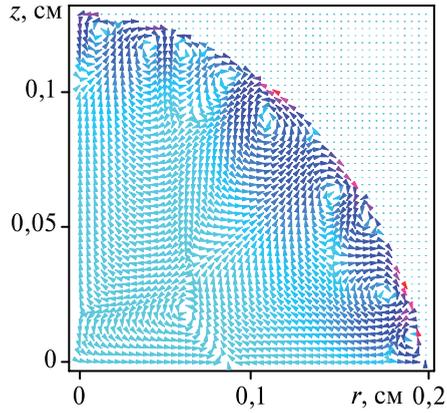


Рис. 3. Поле скорости при  $t = 0,16$  с

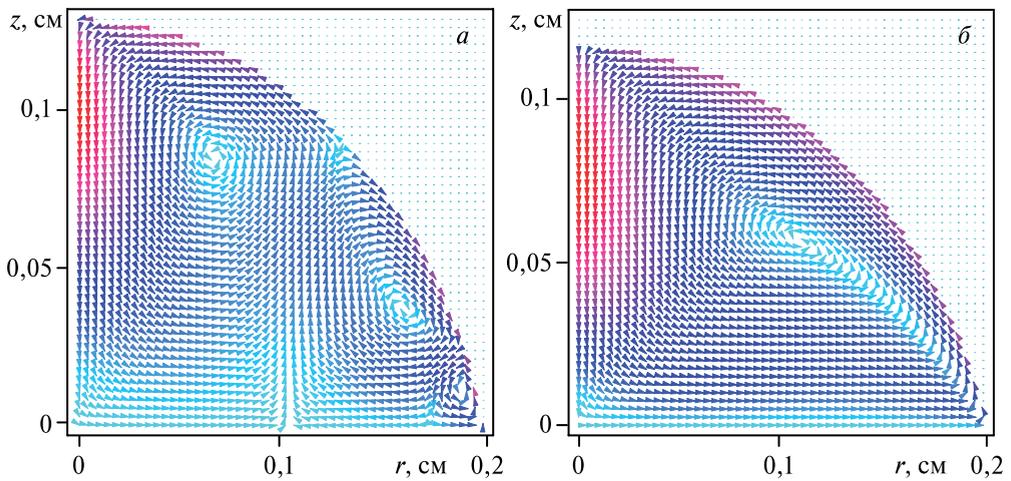


Рис. 4. Распределение скорости: *a* —  $t = 0,5$  с; стадия динамики капли с тремя вихрями длится начиная с  $t \approx 0,45$  до  $\approx 2,0$  с; *б* —  $t = 30$  с; стадия длится в интервале времени от  $t \approx 2,0$  до  $\approx 250$  с

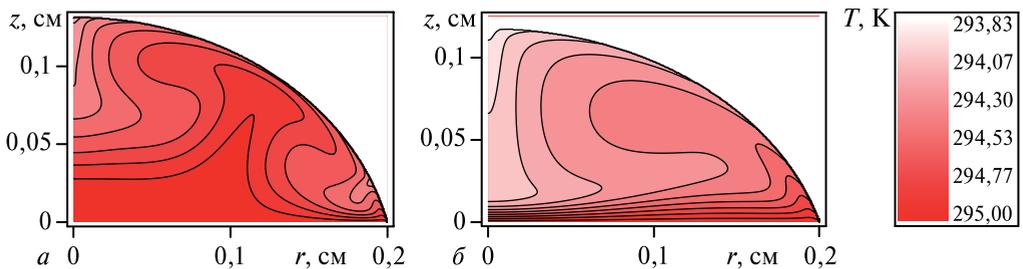


Рис. 5. Распределение температуры в капле для стадии динамики капли: *a* — с тремя вихрями; *б* — с одним вихрем; распределения взяты для моментов времени  $t = 0,5$  и 30 с соответственно; шкала температур показана в правой части рисунка

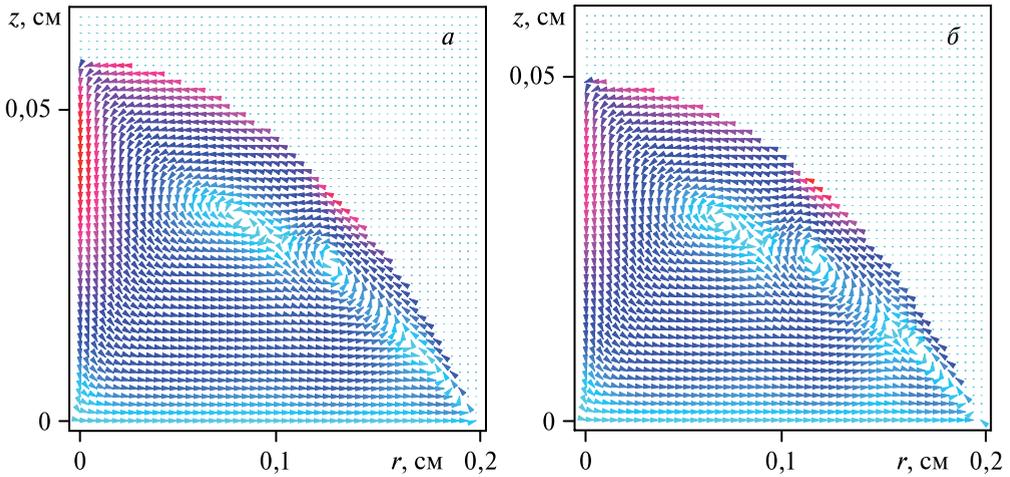


Рис. 6. Пульсация жидкости: *a* —  $t = 263$  с; *б* —  $t = 281$  с

постоянной. В частности, это имеет место для покрытых нитридом кремния подложек, которые использовались в экспериментальных работах (Lin et al., 2001; Narayanan et al., 2004; Bigioni et al., 2006). Нитрид кремния обладает высокой теплопроводностью, примерно на три порядка больше, чем теплопроводность толуола. По этой причине граничные условия для распределения температуры на подложке можно свести к постоянству температуры. Перенос тепла между подложкой и каплей играет важную роль в установлении профиля температуры в капле. Высокая теплопроводность подложки исключает, в частности, возможность обращения направления конвекции Марангони в капле, которая имеет место для подложек с относительно малой теплопроводностью (Ristenpart et al., 2007).

Характерный масштаб изменения температуры на поверхности капли можно оценить, пренебрегая конвективной теплопроводностью. Согласно данным по скорости испарения, тепловые потери на единицу площади капли около ее вершины есть  $Q_0 = 0,027$  Вт/см<sup>2</sup> на ранней стадии процесса испарения. Отсюда для производной температуры по нормали к поверхности можно получить

$|\partial T / \partial n| = 22,88$  К/см. Вычисления показывают, что вдоль оси симметрии температура линейно зависит от высоты над подложкой  $z$ , в пренебрежении конвективной теплопроводностью. Это позволяет получить для разности температур между

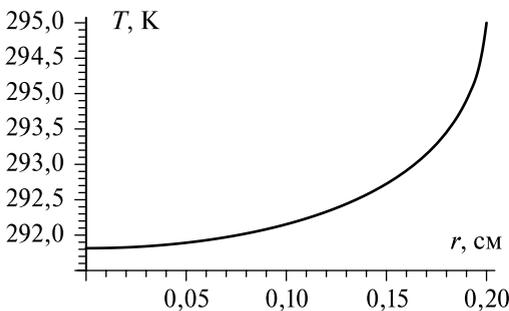
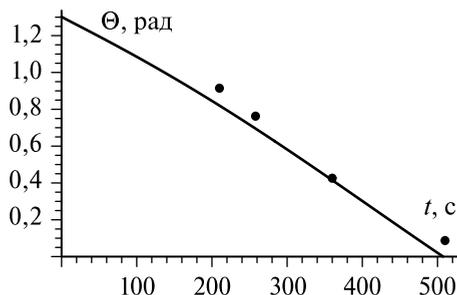


Рис. 7. Профиль температуры вдоль поверхности как функция  $r$  в пренебрежении конвективной теплопроводностью



**Рис. 8.** Изменение со временем контактного угла капли при моделировании процесса испарения (сплошная кривая) и угол ориентации доменов нанокристаллической решетки, полученный из эксперимента (Narayan et al., 2004) (сплошные кружки)

подложкой и вершиной капли величину  $\delta T \approx 3$  К. Такая оценка находится в хорошем согласии с вычисленным распределением температуры вдоль поверхности, которое показано на рис. 7.

### КОНТАКТНЫЕ УГЛЫ

Процесс испарения в режиме пиннинга контактной линии сопровождается увеличением сплюснутости формы капли. На рис. 8 представлены наши результаты для зависимости от времени контактного угла лежащей на подложке капли. Полученная теоретическая зависимость находится в хорошем согласии с данными о контактных углах, экспериментально найденными в работе (Narayanan et al., 2004) для капли коллоидного раствора частиц золота в толуоле с идентичными параметрами. В работе (Narayanan et al., 2004) было обнаружено, что упорядоченные структуры из наночастиц образуются на поверхности капли. По этой причине угол ориентации кристаллической структуры  $\Theta$ , который был измерен в работе (Narayanan et al., 2004) при помощи малоуглового рассеяния рентгеновских лучей, совпадает с контактным углом капли.

### Литература

- Barash L. Yu., Bigioni T. P., Vinokur V. M., Shchur L. N. *Physical Rev. E.* 2009. V. 79. P. 046301
- Bigioni T. P., Lin X. M., Nguyen T. T., Corwin E. I., Witten T. A., Jaeger H. M. // *Nature Materials.* 2006. V. 5. P. 265.
- Deegan R. D. et al. // *Phys. Rev. E.* 2000. V. 62. P. 756.
- Lin X. M., Jaeger H. M., Sorensen C. M., Klabunde K. J. // *J. Phys. Chem. B.* 2001. V. 105. P. 3353.
- Narayanan S., Wang J., Lin X. M. // *Physical Rev. Letters.* 2004. V. 93. P. 135503.
- Pearson J. R. A. // *J. Fluid Mechanics.* 1958. V. 4. P. 489.
- Ristenpart W. D., Kim P. G., Domingues C., Wan J., Stone H. A. // *Physical Rev. Letters.* 2007. V. 99. P. 234502.

**EVAPORATION AND FLUID DYNAMICS OF A DROP  
OF CAPILLARY SIZE LYING ON A SUBSTRATE****L. Yu. Barash, L. N. Shchur, V. M. Vinokur, T. P. Bigioni***Landau Institute for Theoretical Physics of the Russian Academy of Sciences*

Several dynamical stages of the Marangoni convection, characterized by different number of vortices in the drop, are found. During the early stage the array of vortices arises near a surface of the drop and induces a non-monotonic spatial distribution of the temperature over the drop surface. The maximal number of near-surface vortices in the drop is controlled by the Marangoni cell size which is found using formal analogy with flat fluid layers. The number of vortices quickly decreases with time, resulting in three bulk vortices in the intermediate stage. The vortices finally transform into the quasistationary state with single convection vortex in the drop, existing during the longest part of the evaporation time.

## КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ РОСТЕ ДВУМЕРНЫХ СТРУКТУР

А. Ю. Меньшутин, Л. Н. Щур

*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук  
Московский физико-технический институт. E-mail: may@itp.ac.ru*

В работе описывается численный алгоритм для построения двумерных структур роста в рамках модели агрегации, ограниченной диффузией (DLA — Diffusion Limited Aggregation). Обсуждаются способы ускорения процесса численного моделирования. С помощью предложенного алгоритма построен ансамбль из 1000 кластеров, каждый по 50 млн частиц, и вычислена фрактальная размерность  $D(N)$ -ансамбля таких кластеров, как функция числа частиц в кластере  $N$ . Найдена асимптотическая сходимость зависимости  $D(N)$  к значению  $D = 1,7104(3)$ . Описан метод для построения анизотропных кластеров и проведен анализ их свойств в зависимости от количества осей анизотропии. Обнаружен переход в свойствах таких кластеров: при числе осей анизотропии три и четыре получающихся кластера имеют псевдорегулярную структуру с числом главных ветвей, равным числу осей анизотропии. При числе осей анизотропии большем пяти структура полученных объектов близка к структуре объектов, полученных с помощью изотропного алгоритма.

### Введение

Большинство объектов, встречающихся в природе, имеют чрезвычайно сложную структуру, которую невозможно описать простыми геометрическими формами (*Мандельброт, 2002; Морозов, 2002*). Отличительная черта таких объектов — отсутствие минимального масштаба, после которого структура объекта начинает упрощаться. Так, длина береговой линии при ее измерении линейками различной длины окажется возрастающей величиной при уменьшении цены деления линейки. Иными словами, при большей точности измерений длина линии будет большей (*Mandelbrot, 1967*). Объекты, обладающие такими свойствами, называются фракталами, при этом их отличительным свойством является наличие самоподобия (регулярного или статистического). Распространенный метод построения фракталов заключается в использовании специальной рекурсивной процедуры. Одной из таких процедур является алгоритм, предложенный Виттенем и Сандером в 1981 г. (*Witten, Sander, 1981*) и получивший название агрегации, ограниченной диффузией (Diffusion Limited Aggregation — DLA). В основе алгоритма лежит идея о том, что рост агрегата происходит путем налипания частиц,двигающихся случайным образом, друг на друга. Если плотность частиц мала, то можно считать, что за один шаг алгоритма прилипает только одна частица. Размерность фракталов меньше размерности пространства, в котором он построен и в большинстве случаев не есть целая величина. Так, для нахождения фрактальной размерности модели DLA чаще всего используется

соотношение вида  $N \propto R^D$ , где  $R$  — размер кластера, а  $N$  — число частиц в нем. Объекты, построенные по алгоритму Виттена и Сандера, демонстрируют развитую ветвистую структуру и, по-видимому, являются фракталами, численно их фрактальная размерность  $D \approx 1,71$ . Интерес к модели DLA связан с тем, что внешне похожие структуры возникают в различных экспериментах — при образовании языков на границе жидкостей с разными вязкостями (viscous fingering) (Mathiesen et al., 2006), при росте колоний бактерий (Ben-Jacob et al., 1996), при электроосаждении (Matsushita et al., 1984) и многих других (Bunde, Havlin, 1996). Общим для этих структур является доминирование процесса диффузии, поэтому неудивительно, что их форма оказывается одинаковой. Один из важных вопросов связан с классификацией таких объектов — относятся ли они к одному классу универсальности (Barra et al., 2001; Mathiesen et al., 2006). Так, в ячейке Хеле — Шоу, или в пористой среде, скорость жидкости пропорциональна градиенту давления. Если жидкость несжимаемая, то давление в такой системе описывается уравнением Лапласа:  $\nabla^2 p = 0$ . Аналогичные уравнения возникают и в модели DLA при описании ее в терминах электрического потенциала (Niemeyer et al., 1984). При этом давление заменяется электрическим потенциалом.

Флуктуации и шумы, возникающие в DLA вследствие того, что добавление частиц происходит строго по одной, приводят к тому, что не удается построить непрерывную теорию среднего поля с хорошей точностью, описывающую свойства кластера и позволяющую вычислить фрактальную размерность. В большинстве таких моделей фрактальная размерность оказывается существенно занижена (Ryabov et al., 2005). Большое разнообразие моделей, близких к DLA, а также различных теоретических подходов требует их сравнения между собой и с точными численными данными. Применяя более совершенные технические средства, а также разрабатывая новые методы изучения таких объектов, мы рассчитываем изучить асимптотические свойства кластеров, влияние анизотропии на их рост и провести их классификацию на основе различий в их свойствах в пределе бесконечно больших размеров систем.

В первой части работы описывается алгоритм построения кластеров DLA. Приводятся различные методы, позволяющие ускорить численное моделирование. Во второй части дается описание методов измерения фрактальной размерности, а также результаты ее измерения как функции размера кластера в пределе бесконечно малых пробных частиц. В третьей части описан алгоритм построения анизотропных кластеров и проведен анализ их свойств и их классификация.

## АЛГОРИТМ

Поскольку рост кластеров DLA исследуется численно, то разработка эффективного алгоритма является важной задачей, от успеха решения которой зависит вся остальная часть исследования. Исходный алгоритм, предложенный в оригинальной работе Виттена и Сандера (Witten, Sander, 1981), состоит из следующих шагов.

1. На квадратной двумерной решетке в начале координат находится частица-зародыш (занятая клетка).
2. Вдали от кластера (от зародыша) рождается новая частица.
3. Новая частица блуждает случайным образом.
4. Если частица подходит вплотную к занятой клетке, то она прилипает.
5. Если частица уходит достаточно далеко от кластера, она уничтожается.
6. Повтор — начиная с шага 3 до тех пор, пока частица не прилипнет или не погибнет, после чего происходит запуск новой частицы (шаг 2).

Объекты, построенные таким способом, проявляют фрактальные свойства и представляют собой кластеры. По внешнему виду (и по ряду свойств) они похожи на кристаллы, затвердевающие из расплава или из солей, а также на колонии бактерий и другие объекты, встречающиеся в природе.

Алгоритм для построения кластеров, предложенный Виттенем и Сандером, стал первым, позволяющим моделировать рост таких объектов. Однако в форме, изложенной выше, данный алгоритм требует доопределения, а именно не заданы области, где происходит рождение и уничтожение частиц. Чаще всего их задают окружностями радиуса  $R_b$  и  $R_d$ , причем  $R_d \gg R_b$ .

Основная проблема, возникающая при использовании решетки для роста кластера, заключается во влиянии самой решетки на свойства кластера. Кластеры, получающиеся при использовании данного метода, проявляют симметрию 4-го порядка (*Ball, Brady, 1985*). Наиболее логичный шаг состоит в отказе от использования решетки и переходе к безрешеточной модели, в которой частицы представляются окружностями. При этом случайное блуждание моделируется как шаг конечной длины в случайном направлении. Частицы, начинающие движение вдали от кластера, подходят к нему равномерно, т. е. вероятность первого пересечения окружности, описывающей кластер, есть функция, не зависящая от угла. Это позволяет использовать в качестве окружности рождения  $R_b$  окружность, описывающую кластер, т. е. минимальную из возможных окружностей.

Вторая важная модификация, базирующаяся на равномерности распределения случайного блуждания, заключается в возможности увеличения длины шага, если частица находится вдали от кластера. Если расстояние от частицы до кластера равно  $\Delta r$ , то можно вместо единичного шага взять шаг, незначительно меньший  $\Delta r$ .

Третья, принципиально самая важная модификация, следует из того факта, что на плоскости вероятность ухода частицы на бесконечность равна 0, т. е. любая частица рано или поздно коснется кластера. Это означает, что  $R_d$  должно быть бесконечно велико. Но при этом частицы, отошедшие далеко от кластера, могут затратить много времени на возврат обратно даже при использовании шагов большой длины. Использование же конечной величины  $R_d$ , такой что  $R_d \gg R_b$ , приводит к искажению вероятностей роста кластера.

В нашем алгоритме применяется аналитически вычисленная вероятность возврата из точки  $r > R_b$  на окружность  $R_b$ . Если частица находится в точке  $(0, r)$ , то вероятность ее возврата в точку  $(R_b \cos \varphi, R_b \sin \varphi)$  как функция угла есть

$$P(\varphi) = \frac{x^2 - 1}{2\pi(x^2 - 2x \cos\varphi + 1)},$$

где  $x = r/R_b$ .

Используя эту зависимость и генерируя случайные числа с таким распределением, мы находим новую координату для частиц, вышедших за окружность возврата  $R_b$ . Для того чтобы хранить в памяти координаты частиц, из которых состоит кластер, применяется комбинированная схема из алгоритмов, предложенных Болом (*Ball, Brady*, 1985) и Микеном (*Meakin*, 1985). При этом частицы хранятся внутри ячеек размером 32, и в каждой ячейке записан размер свободной зоны вокруг нее. Данный алгоритм позволяет построить кластер из 50 млн частиц за 3 ч на компьютере с процессором Pentium 4 и 2 Гбайт оперативной памяти. Типичный кластер, построенный по этому алгоритму, показан на рис. 1 (см. с. 235).

## ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ

В отличие от традиционных объектов евклидовой геометрии, форма которых на плоскости описывается двумя величинами (длиной и шириной), форма фрактального объекта задается рекурсивным алгоритмом его построения. Геометрической величиной, характеризующей фрактальные объекты, является фрактальная размерность, при этом отличительное свойство таких объектов — свойство самоподобия. Применительно к структурам роста это означает, что соблюдается соотношение скейлинга  $N \propto R_D^D$ , где  $N$  — масса объекта (число частиц), а  $R$  — его геометрический размер. Величина  $D < d$ , где  $d$  — размерность пространства, называется фрактальной размерностью и является обобщенной характеристикой структуры объекта.

При изучении DLA за величину  $R$  можно принять размер кластера, состоящего из  $N$  частиц. Также можно изучать зависимость числа частиц, лежащих внутри окружности радиуса  $R$ , от ее размеров. Два основных метода, использующихся для вычисления  $R$ , заключаются в использовании различных средних величин. Если имеется  $K$  ансамблей кластеров и  $r_i(N)$  — положение  $N$ -й частицы в  $i$ -м ансамбле, то среднее по ансамблю

$$\langle r(N) \rangle = \sum_{i=1}^K r_i(N) / K$$

называется радиусом осаждения  $R_{dep}$ . Также используются величины  $R_2$ , радиус инерции  $R_{gy}$ , средняя глубина проникновения  $\xi$ .

Итак, мы определили метод вычисления величин, средних по ансамблю кластеров. Можно ввести другой метод вычисления средних, при котором усреднение проводится по поверхности кластера с весом, равным вероятности роста в данной точке поверхности. Такие средние называются средними по гар-

монической мере и обычно обозначаются как  $\int r dq$ . Определения различных величин и результаты расчета фрактальной размерности приведены в таблице.

Величина	Среднее по ансамблю	$D$	Среднее по гармонической мере	$D$
$R_{der}$	$\langle r \rangle$	1,70942(46)	$\langle \int r dq \rangle$	1,70922(97)
$R_2$	$\sqrt{\langle r^2 \rangle}$	1,71003(45)	$\sqrt{\langle \int r^2 dq \rangle}$	1,7087(11)
$R_{gvr}$	$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \langle r^2 \rangle_k}$	1,71008(96)	—	—
$R_{eff}$	—	—	$\langle \exp(\int \ln r dq) \rangle$	1,70944(87)
$\xi$	$\sqrt{R_2^2 - R_{dep}^2}$	1,74(3)	$\sqrt{R_2^2 - R_{dep}^2}$	1,69(7)

Как показано в работе (Menshutina, Shchur, 2006), предсказать асимптотические свойства кластера путем измерения фрактальной размерности  $D$  любым из описанных выше методов практически не представляется возможным. Ошибка измерения (флуктуация)  $D$  убывает с ростом кластера чрезвычайно медленно. Для преодоления этого препятствия нами был предложен метод (Menshutina et al., 2007; Menshutina et al., 2008) измерения фрактальной размерности с помощью средних по гармонической мере, вычисленных с помощью пробных частиц переменного размера. При уменьшении размера пробных частиц эффективный размер кластера увеличивается, при этом улучшается сходимость свойств кластера к своим асимптотическим значениям.

Результат вычисления фрактальной размерности ансамбля из 1000 кластеров, каждый по 50 млн частиц, в пределе бесконечно малых размеров пробных частиц показан на рис. 2.

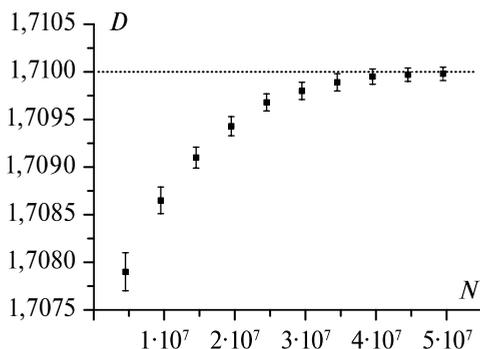


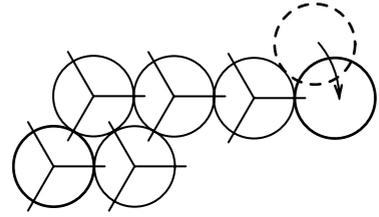
Рис. 2. Фрактальная размерность ансамбля из 1000 кластеров, каждый по 50 млн частиц, как функция размера кластера. Значения получены в пределе бесконечно малых пробных частиц

## АНИЗОТРОПНЫЕ КЛАСТЕРЫ И ИХ СВОЙСТВА

### Алгоритм построения анизотропных кластеров

Как известно, кластеры, выращенные на решетке, проявляют анизотропные свойства (Ball et al., 1985). В эксперименте такие объекты могут возникнуть, если рост объекта происходит на подложке с определенными свойствами или если взаимодействие частиц имеет ярко выраженную анизотропию (Sadowski et al., 2007). Кроме того, варьируя анизотропию, можно влиять на число ветвей (Ball, 1986; Meakin, 1986) и их положение и изучать влияние эффектов экранировки на рост кластера. Используя разработанную методику определения фрактальной размерности, мы изучаем свойства кластеров, выращенных с использованием анизотропных правил прилипания частиц, и их асимптотические свойства. Алгоритмы для генерации кластеров на решетке значительно более сложны для эффективной реализации, так как большинство методов, использующихся для ускорения движения частиц в этом случае, не применимы из-за отсутствия радиальной симметрии у функции вероятности, описывающей случайное блуждание. Наиболее простой подход к решению этой проблемы заключается в использовании безрешеточного алгоритма, дополненного правилами, описывающими поведение частиц вблизи кластера. Различные варианты этих подходов приведены в работах (Ball, 1986; Meakin, 1986). В первом подходе используется метод антенн — у каждой частицы в кластере есть выделенные точки (антенны). После касания кластера новая частица смещается к ближайшей антенне. При этом антенны располагаются на всех частицах кластера вдоль одних и тех же глобальных осей анизотропии, и их вращения не происходит. У новой частицы после ее добавления к кластеру появляются антенны вдоль осей анизотропии. В данном методе количество  $N_{fp}$  и положение антенн может быть произвольным. Второй метод, применяющийся для генерации анизотропных кластеров безрешеточным алгоритмом, предложен Микеном (Meakin, 1986) и заключается в использовании решетки заданной симметрии вблизи кластера. Вдали от кластера частицы движутся, подчиняясь стандартным правилам. При приближении частицы к кластеру на расстояние в несколько шагов частица смещается в ближайшую ячейку решетки и двигается по ней. При этом сами частицы кластера обозначаются как занятые ячейки на решетке. В таком варианте возможно использование только трех разновидностей решеток — с симметрией 3, 4 и 6. В настоящей работе мы применяем метод антенн для генерации анизотропных кластеров, так как он проще для эффективной реализации, позволяет менять число антенн (и анизотропию кластера) в широких пределах, осуществить вариацией числа антенн  $N_{fp}$  переход к исходному изотропному алгоритму, устремив  $N_{fp}$  к бесконечности. Кроме того, этот метод проще для теоретического описания — при использовании метода антенн происходит перераспределение гармонической меры на поверхности частиц в кластере. Для определения вероятности роста в фиксированной точке нужно исходную вероятность, полученную в изотропном алгоритме, проинтегрировать относительно поверхности частицы кластера, соответствующей области притяжения данной

**Рис. 3.** Применение метода антенн для построения анизотропных кластеров



антенны. То есть исходная вероятность роста заменяется суммой дельта-функций в точках, где рост разрешен. Применение метода показано на рис. 3. Первоначальное положение частицы, коснувшейся кластера, показано пунктирной окружностью. После касания кластера частица сдвигается в направлении ближайшей антенны и остается в этом положении. Минимальное число антенн  $N_{fp}$ , которое может использоваться в расчетах, равно 3, при этом каждой антенне соответствует свой сектор притяжения в  $120^\circ$ . Если в каком-то секторе (около антенны) уже есть другая частица, то новая частица попасть в этот сектор не может из-за геометрических ограничений. Единственная ситуация, когда это возможно, — попадание частицы в точку, принадлежащую границе двух секторов. При этом возникает неоднозначность по выбору ближайшей антенны. На практике, так как все числа являются случайными, такими ситуациями можно пренебречь, поскольку вероятность такого события чрезвычайно мала — порядка  $1/2^m$ , где  $m$  — число бит, используемых для записи угла. Для типа *double*  $m = 52$ . Сказанное верно и для большего числа антенн.

### Влияние анизотропии на структуру кластеров

Для анализа свойств анизотропных кластеров, построенных методом антенн, было проведено численное моделирование и сгенерировано восемь ансамблей по 1000 кластеров из  $5 \cdot 10^7$  частиц. Шесть ансамблей построено для определенного значения числа антенн ( $N_{fp} = 3, 4, 5, 6, 7, 8$ ) и два ансамбля по 1000 кластеров — безрешеточным алгоритмом ( $N_{fp} = \infty$ ). Каждый из кластеров, выращенных при  $N_{fp} = 3$  и 4, демонстрирует четко выраженные ветви, растущие вдоль направления осей анизотропии (рис. 4 на с. 235). С увеличением числа антенн взаимное влияние ветвей (экранировка) увеличивается, вместе с этим растут и флуктуации направления роста вдоль осей анизотропии и для кластеров с числом антенн, большим 5, заметного роста вдоль выделенных осей не наблюдается, при этом положение ветвей и их количество меняются хаотически (см. рис. 4 на с. 235). По виду одного кластера при  $N_{fp} > 5$  невозможно точно определить число ветвей.

Многие авторы (*Kertesz, Vicsek, 1986; Ball, 1986; Meakin, 1987*) предлагают использовать метод уменьшения шума для демонстрации наличия у кластеров четко выраженных осей анизотропии. При использовании этого метода рост кластера происходит только в том случае, если вероятность роста в точке касания выше некоторого минимального числа. Численно это легко реализовать путем приписывания счетчика каждой частице, который увеличивается на 1 после касания частицы кластера пробной частицей. Если число касаний

больше порогового значения  $M$ , то эта частица прилипает. В противном же случае она уничтожается. Считается, что метод уменьшения шума позволяет ускорить переход кластера к асимптотическому пределу. Очевидно, что при  $M \rightarrow \infty$  рост будет происходить только в точках с максимальной вероятностью роста, каковыми являются концы ветвей. Мы полагаем, что при этом свойства кластера будут существенно искажены. Для анализа и сравнения свойств кластеров вместо методов уменьшения шума мы используем кластеры, состоящие из большого числа частиц  $5 \cdot 10^7$ , а также усреднение по ансамблю из 1000 кластеров. Средняя по ансамблю плотность частиц на единицу площади показана на рис. 5 (см. с. 236).

Различные цвета показывают плотность частиц в данной точке. Кластеры с тремя и четырьмя осями анизотропии обладают четко выраженной симметрией 3-го и 4-го порядка, а также числом ветвей, равным числу осей анизотропии. Кластеры с  $N_{fp} = 5$  демонстрируют структуру с пятью главными ветвями. При больших числах  $N_{fp}$  форма кластеров близка к сферически симметричной. При построении кластеров за положение первой оси выбирается положительное направление оси абсцисс, другие оси расположены через угол в  $2\pi/N_{fp}$  рад. Для кластеров с  $N_{fp} = 3, 4$  ветви располагаются вдоль осей анизотропии, что можно было бы объяснить следующим образом. Частицы с максимальной вероятностью роста находятся на краях самых дальних ветвей. При прилипании частицы она смещается в направлении ближайшей оси, а для частиц на краях ветвей это направление совпадает с направлением роста самой ветви. Возникающий эффект напоминает положительную обратную связь. Однако для  $N_{fp} = 5$  картина неожиданно меняется — там, где расположены оси, вероятность роста оказывается минимальной, а ветви растут в направлении максимально удаленном от всех осей, т. е. посередине между ними.

Эффект поворота преимущественного направления роста ветвей хорошо виден, если построить среднюю по ансамблю плотность частиц по углу. Зависимость  $P(\varphi)$  для кластеров с  $N_{fp} = 3, 4, 5, 6$  приведена на рис. 6.

Для кластеров с  $N_{fp} = 3, 4$  максимальная плотность частиц расположена вдоль осей анизотропии, число максимумов плотности  $P(\varphi)$  совпадает с числом этих осей. Для кластеров с  $N_{fp} = 5$  картина меняется. Число максимумов опять совпадает с числом осей, но сами максимумы сдвинуты на угол, равный  $\pi/5$ . В данной ситуации рост кластера происходит преимущественно не вдоль осей, а между ними.

При дальнейшем увеличении числа осей происходит приближение структуры кластера к кластеру, выращенному без использования анизотропных правил. На рис. 6 показана плотность частиц по углу для кластера с числом осей анизотропии, равным 6. Максимумы номер 5 и 6 расщепляются на два экстремума меньшей амплитуды, т. е. одна ветвь расщепляется на две, а общее количество ветвей точно не определено. Как и для случая  $N_{fp} = 5$ , положение максимумов не совпадает с положением осей. При больших числах  $N_{fp}$  зависимость  $P(\varphi)$  становится хаотической, проследить какую-либо структуру ветвей невозможно.

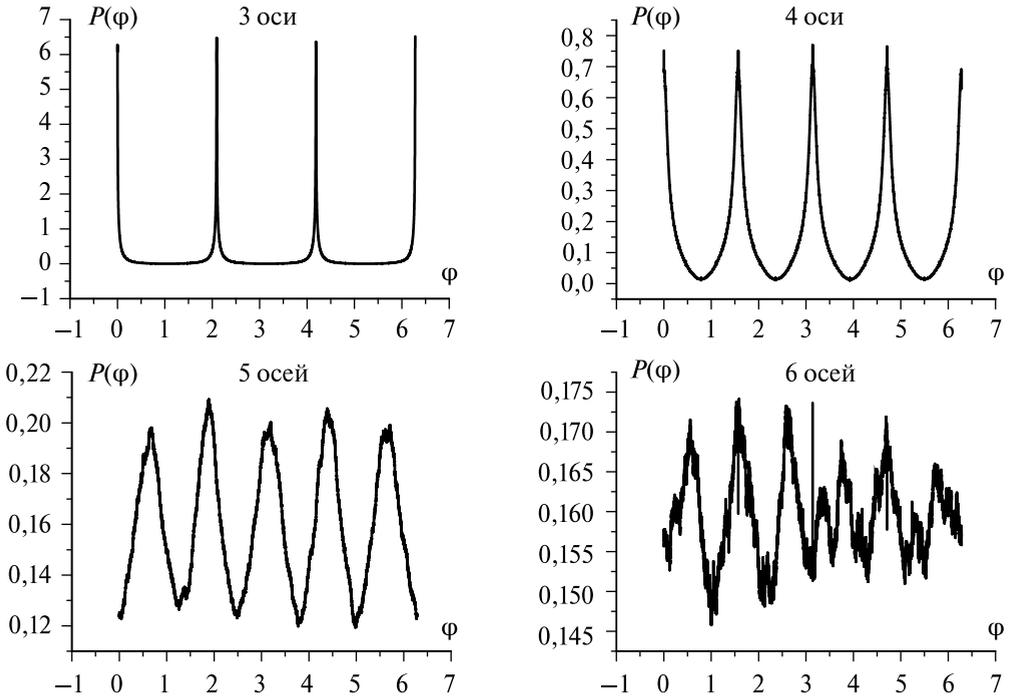


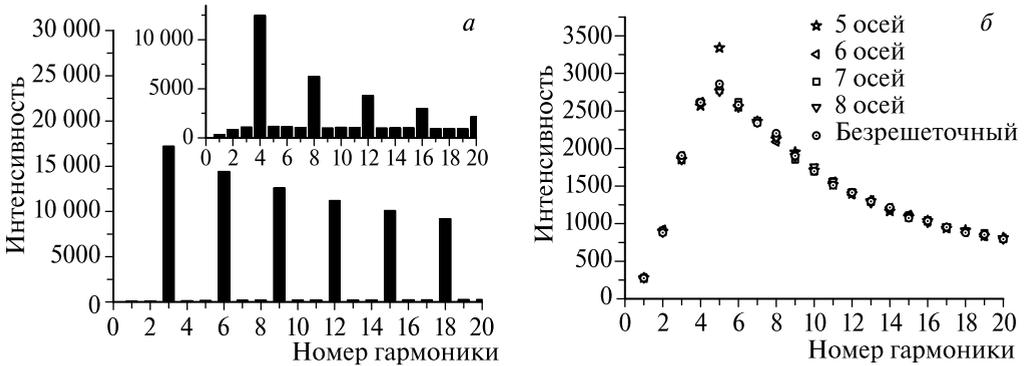
Рис. 6. Средняя плотность частиц по углу в анизотропных кластерах, выращенных с числом осей, равным 3, 4, 5, 6

### Спектр Фурье для плотности частиц по углу

Для кластеров с  $N_{fp} < 6$  рост происходит либо вдоль осей анизотропии, либо между ними, при этом число главных ветвей (по количеству максимумов в функции плотности частиц по углу) совпадает с  $N_{fp}$ . Возможно ли, что и при больших числах  $N_{fp}$  количество главных ветвей является фиксированной величиной? Так как при приближении осей анизотропии друг к другу увеличивается взаимодействие ветвей между собой, можно предположить, что направление роста главных ветвей у каждого кластера меняется случайным образом, но при этом число главных осей остается неизменным. Тогда усреднение плотности по ансамблю приведет к сферически симметричной функции распределения, что и наблюдается на рис. 5. Чтобы ответить на этот вопрос, следует проанализировать каждый кластер по отдельности. Для этого изучим спектр фурье-функции  $P(\varphi)$  каждого кластера. Так как эта функция является периодической, то ее можно разложить в ряд Фурье:

$$P_i(\varphi) = a_{0,i} + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n,i} \cos(nx) + b_{n,i} \sin(nx),$$

где  $i$  — номер кластера. При этом наиболее ярко выраженная гармоника, т. е. гармоника с максимальной интенсивностью, будет соответствовать числу ветвей



**Рис. 7.** Спектр фурье-распределения плотности частиц по углу для кластеров: *a* — с 3, 4 осями анизотропии; *б* — с 5, 6, 7, 8 осями анизотропии и безрешеточные кластеры

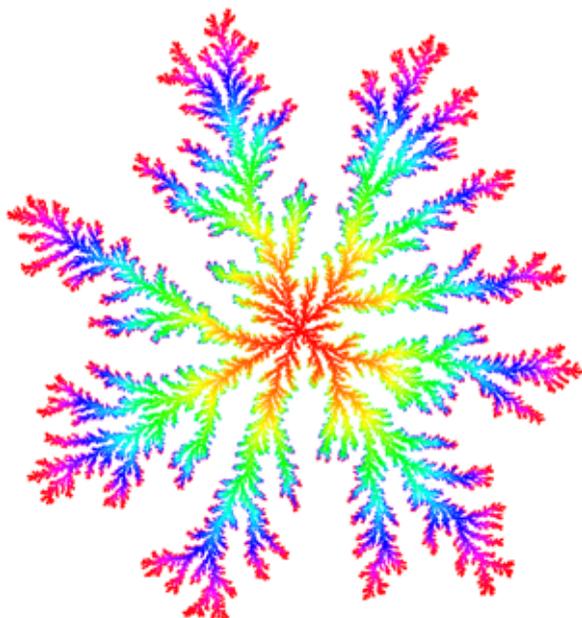
в кластере. Так как направление ветвей в каждом отдельном кластере нас не интересует, за интенсивность  $n$ -й гармоники принимаем  $I_{n,i} = \sqrt{a_{n,i}^2 + b_{n,i}^2}$ , после этого производим усреднение величины  $I_{n,i}$  по ансамблю. Результаты вычисления величины  $I_n$  для кластеров с разными числами  $N_{fp}$  приведены на рис. 7.

Спектры  $I_n$  для кластеров с  $N_{fp} = 3, 4$  демонстрируют наличие четко выраженных главных ветвей в количестве, совпадающем с числом осей анизотропии. У кластеров с  $N_{fp} > 5$  спектры полностью совпадают, т. е. они обладают одинаковой формой и структурой. Спектр кластеров с  $N_{fp} = 5$  близок к спектру кластеров с большим числом осей анизотропии, но пятая гармоника обладает чуть большей интенсивностью. Исходя из вида спектра фурье-функции плотности частиц по углу можно отнести кластеры с  $N_{fp} = 3, 4$ ,  $N_{fp} = 5$  и  $N_{fp} > 5$  к разным классам. При этом свойства кластеров с  $N_{fp} > 5$ , по-видимому, совпадают с безрешеточными кластерами. Случай же  $N_{fp} = 5$  является переходным.

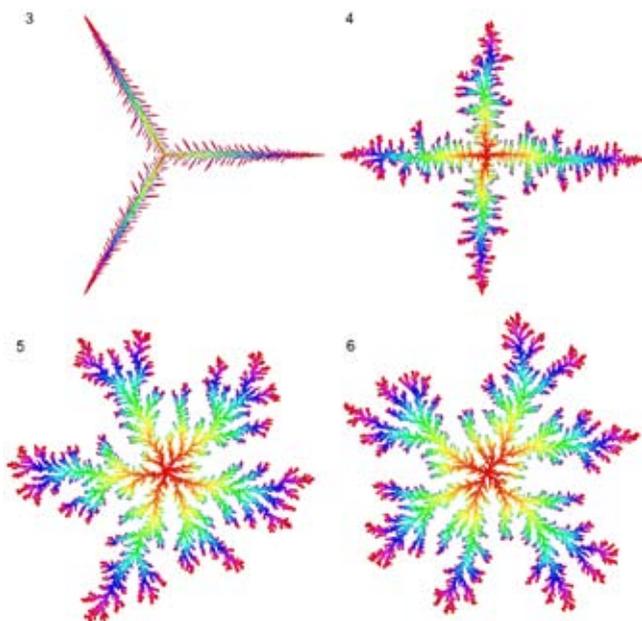
### Фрактальная размерность анизотропных кластеров

В предыдущей части были изучены кластеры, построенные с применением анизотропных правил для прилипания частиц друг к другу. При этом изучалась их геометрическая структура, отражающая количество наиболее развитых ветвей. В этом разделе мы проведем анализ поведения фрактальной размерности ансамбля кластеров при изменении числа осей анизотропии  $N_{fp}$ . Мы исследуем фрактальную размерность как функцию числа частиц в кластере, вычисленную по  $R_{dep}^{hm}$  в пределе бесконечно малого размера пробных частиц. Результирующая фрактальная размерность  $D(N)$  показана на рис. 8 (см. с. 236).

На этом же рисунке приведены зависимости фрактальной размерности от числа частиц в кластере для кластеров с числом осей анизотропии 5, 6, 7 и 8. Фрактальная размерность у кластеров с числом осей 6, 7, 8 и безрешеточных совпадает. Такой вывод подтверждают и результаты анализа спектров функции



**Рис. 1.** Типичный кластер DLA. Размер кластера — 50 млн частиц. Разные цвета соответствуют разному возрасту частиц



**Рис. 4.** Кластеры, выращенные с числом осей анизотропии, равным 3, 4, 5 и 6

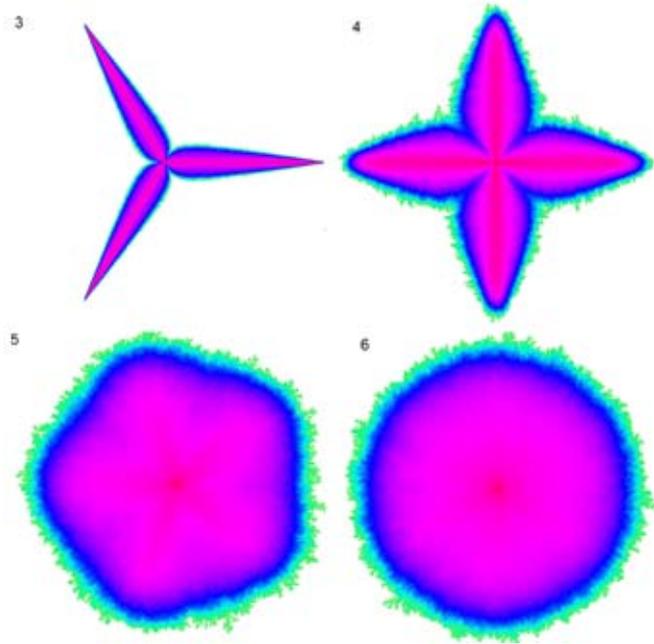


Рис. 5. Средняя по ансамблю плотность частиц на единицу поверхности

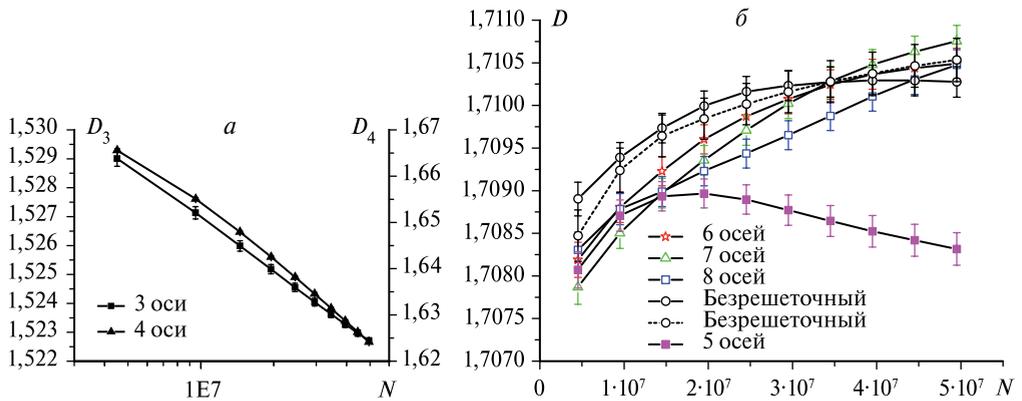


Рис. 8. Фрактальная размерность ансамбля кластеров как функция числа частиц в кластере: *a* — с 3, 4 осями анизотропии; *б* — с 5, 6, 7, 8 осями анизотропии и безрешеточные кластеры

плотности частиц по углу. Кластеры с числом осей 5 при малых  $N$  ведут себя похожим образом, но начиная с 15 млн частиц в кластере начинается близкое к линейному уменьшение фрактальной размерности. Для кластеров с 3 и 4 осями анизотропии (см. рис. 8) фрактальная размерность убывает логарифмически с ростом размеров кластеров. Существуют предположения, что минимальное

значение фрактальной размерности на плоскости равно  $3/2$  (Ball, 1986; Popescu et al., 2004; Ball et al., 1985, Turkevich, Scher, 1985; Meakin, 1983). К сожалению, используя полученные нами данные, данную гипотезу нельзя ни подтвердить, ни опровергнуть. Если при больших  $N$  фрактальная размерность станет  $D < 3/2$ , то это будет означать, что такие кластеры не являются фракталами, так как их размерность стремится к единице. Если логарифмическая скорость убывания сохранится в дальнейшем, то уже при  $N = 10^{11}$   $D = 3/2$ . К сожалению, на данный момент построить кластер такого размера не представляется возможным. Полученная нами зависимость  $D(N)$  для  $N_{fp} = 3$  близка к зависимости, полученной Микином в работе (Meakin, 1983) (с учетом больших размеров кластеров в нашей работе), но значительно отличается для случая  $N_{fp} = 4$ . Наши данные также противоречат предсказаниям Туркевича и Шера (Turkevich, Scher, 1985) —  $D = 5/3$  для четырехугольной решетки и  $D = 7/4$  — для гексагональной ( $N_{fp} = 3$ ). Таким образом, идея Туркевича и Шера о том, что свойства кластера определяются только ростом самых длинных ветвей и не зависят от внутренней структуры, противоречит измеренной в нашей работе фрактальной размерности, а также наблюдающейся ее зависимости от размеров пробных частиц. Дальнейший анализ псевдорешеточных кластеров с использованием методов уменьшения шума показывает, что при  $N_{fp} = 5$  кластеры приобретают форму и свойства, аналогичные кластерам с  $N_{fp} = 3, 4$ , — убывающая фрактальная размерность, изменение ориентации преимущественного направления роста и спектр с гармониками, кратными 5. Таким образом, решеточные кластеры, а также кластеры, построенные с помощью методов уменьшения шума, принадлежат к другому классу универсальности в отличие от безрешеточных кластеров и кластеров с  $N_{fp} > 3$ , выращенных без использования методов уменьшения шума.

### Заключение

Корректный учет граничных условий на бесконечности для диффузии, подчиняющейся двумерному уравнению Лапласа, позволил построить безрешеточный алгоритм роста DLA-кластеров, в котором отсутствует взрывная неустойчивость. Разработанный метод определения эффективного значения фрактальной размерности путем оценки гармонической меры пробными частицами произвольного радиуса позволил выявить монотонную зависимость эффективной фрактальной размерности от размеров кластера. Модификация алгоритма с введением локальной анизотропии позволила провести классификацию двумерных кластеров DLA. При числе осей анизотропии, меньшем пяти, мы наблюдаем рост фрактальных кристаллов с асимптотической размерностью  $D = 3/2$ . При числе осей анизотропии, большем пяти, мы наблюдаем рост случайных фракталов с асимптотической размерностью  $D = 1,710\dots$ . Анизотропия пятого порядка является пограничной.

Меньшутин Антон благодарит Фонд некоммерческих программ «Династия» и «Региональный общественный фонд содействия отечественной науке» за финансовую поддержку данной работы.

## Литература

- Мандельброт Б. Б.* Фрактальная геометрия природы. М.: Ин-т компьютерных исслед., 2002.
- Морозов А. Д.* Введение в теорию фракталов. М.: Ин-т компьютерных исслед., 2002.
- Ball R. C., Brady R. M., Rossi G., Thomson B. R.* Anisotropy and Cluster Growth by Diffusion-Limited Aggregation // *Physical Rev. Letters*. 1985. V. 55. P. 1406.
- Ball R. C., Brady R. M.* Large scale lattice effect in diffusion-limited aggregation // *J. Phys. A*. 1985. V. 18. P. L809.
- Ball R. C.* Diffusion limited aggregation and its response to anisotropy // *Physica A*. 1986. V. 140. P. 62.
- Ben-Jacob E., Shochet O., Tenenbaum A., Cohen I.* Response of bacterial colonies to imposed anisotropy // *Phys. Rev. E*. 1996. V. 53. P. 1835.
- Bunde A., Havlin S.* (Ed.) *Fractals and Disordered Systems*. B.:Springer, 1996.
- Barra F., Davidovich B., Levermann A., Procaccia I.* Laplacian Growth and Diffusion Limited Aggregation: Different Universality Classes // *Physical Rev. Letters*. 2001. V. 87. Art. 134501.
- Halsey T. C., Leibig M.* Theory of branched growth // *Physical Rev. A*. 1992. V. 46. P. 7793.
- Meakin P.* Diffusion-controlled cluster formation in 2-6-dimensional space // *Physical Rev. A*. 1983. V. 27. P. 1495.
- Kertesz J., Vicsek T.* Diffusion-limited aggregation and regular patterns: fluctuations versus anisotropy // *J. Phys. A*. 1986. V. 19. P. 257.
- Mandelbrot B.* How Long is the Coast of Britain? Statistical Self-Similarity and Fractional Dimension // *Science*. 1967. V. 156. P. 636.
- Mathiesen J., Procaccia I., Swinney H. L., Thrasher M.* The universality class of diffusion-limited aggregation and viscous fingering // *Europhys. Lett*. 2006 V. 76. P. 257.
- Matsushita M., Sano M., Hayakawa Y., Honjo H., Sawada Y.* Fractal Structures of Zinc Metal Leaves Grown by Electrodeposition // *Physical Rev. Letters*. 1984. V. 53. P. 286.
- Meakin P.* The structure of two-dimensional Witten-Sander aggregates // *J. Phys. A*. 1985. V. 18. P. L661.
- Meakin P.* Universality, nonuniversality, and the effects of anisotropy on diffusion-limited aggregation // *Physical Rev. A*. P. 1986. V. 33. P. 3371.
- Meakin P.* Noise-reduced diffusion-limited aggregation // *Physical Rev. A*. 1987. V. 36. P. 332.
- Menshutina A. Yu., Shchur L. N.* Test of mutiscaling in a diffusion-limited-aggregation model using an off-lattice killing-free algorithm // *Physical Rev. E*. P. 2006. V. 73. P. 011407.
- Menshutina A. Yu., Shchur L. N., Vinokur V. M.* Probing surface characteristics of diffusion-limited-aggregation clusters with particles of variable size // *Physical Rev. E*. 2007. V. 75. Art. 010401 (R).

- Menshutin A. Yu., Shchur L. N., Vinokur V. M.* Finite size effect of harmonic measure estimation in a DLA model: Variable size of probe particles // *Physica A*. 2008. V. 387. P. 6299.
- Niemeyer L., Pietronero L., Wiesmann H. J.* Fractal Dimension of Dielectric Breakdown // *Physical Rev. Letters*. 1984. V. 52. P. 1033.
- Popescu M. N., Hentschel H. G. E., Family F.* Anisotropic diffusion-limited aggregation // *Physical Rev. E*. 2004. V. 69. P. 061403.
- Ryabov A. B., Postnikov E. B., Loskutov A. Yu.* Diffusion-limited aggregation: A continuum mean field model // *JETP*. 2005. V. 101. P. 235.
- Sadowski J. T., Sazaki G., Nishikata S., Al-Mahboob A., Fujikawa Y., Nakajima K., Tromp R. M., Sakurai T.* Single-Nucleus Polycrystallization in Thin Film Epitaxial Growth // *Physical Rev. Letters*. 2007. V. 98. Art. 046104-4.
- Turkevich L. A., Scher H.* Occupancy-Probability Scaling in Diffusion-Limited Aggregation // *Physical Rev. Letters*. 1985. V. 55. P. 1026.
- Witten T. A., Sander L. M.* Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon // *Physical Rev. Letters*. 1981 V. 47. P. 1400.

## CRITICAL PHENOMENON IN TWO DIMENSIONAL GROWTH STRUCTURES

A. Yu. Menshutin, L. N. Shchur

*Landau Institute for Theoretical Physics of the Russian Academy of Sciences  
Moscow Institute of Physics and Technology (State University)*

We describe a numerical algorithm for two-dimensional growth of DLA (Diffusion Limited Aggregation) clusters. We discuss how simulations may be accelerated. We build up ensemble with 1000 clusters of 50 million particles each and compute fractal dimension  $D(N)$  of the ensemble of clusters as function of the number of particles in the cluster. We found asymptotic limit of the  $D(N)$ , it is  $D = 1.7104(3)$ . We describe method to construct anisotropic clusters and analyze their properties depending on the order of anisotropy axes. We found transition in the properties of such clusters: with 3-fold and 4-fold anisotropy the resulting clusters shows pseudo-regular structure with the number of the main branches equal to the order of anisotropy axis. If order of anisotropy larger than five the resulting clusters show structure which is close to the one obtained with isotropic algorithm.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ СТРУКТУРНО-НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

**В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов,  
А. С. Криницын, М. В. Рычков**

*Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского  
E-mail: prudnikov@univer.omsk.su*

Дан анализ актуальности применения методов численного описания проблемы фазовых переходов в однородных и структурно-неупорядоченных системах. Осуществлено численное исследование методом Монте-Карло неравновесного критического поведения для структурно-неупорядоченных трехмерных ферромагнетиков, описываемых моделью Изинга, в широкой области изменения концентрации точечных дефектов структуры для различных начальных неравновесных состояний системы. Определены динамические и статические характеристики критического поведения неупорядоченной системы и осуществлено их сопоставление с результатами аналитического теоретико-полевого описания для слабо-неупорядоченных систем.

Проблема описания фазовых переходов одна из наиболее сложных и постоянно актуальных задач статистической теории. При  $\tau = (T - T_c)/T_c \ll 1$ , где  $T_c$  — критическая температура, наблюдаются аномально большие и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических переменных, характеризующиеся эффективно сильным взаимодействием между собой.

На это указывает, например, для магнитных систем статическая корреляционная функция флуктуаций спиновой плотности  $S(r)$ :

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \langle S(\vec{r})S(\vec{r}') \rangle - \langle S(\vec{r}) \rangle \langle S(\vec{r}') \rangle \propto \frac{e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{\xi(\tau)}}}{|\vec{r} - \vec{r}'|^{d-2+\eta}} \rightarrow \frac{1}{|r - r'|^{d-2+\eta}}, \quad (1)$$

$$\xi(\tau) \propto |\tau|^{-\nu} \rightarrow \infty,$$

в которой длина корреляции флуктуаций  $\xi(\tau)$  аномально растет с приближением к критической температуре ( $\tau \rightarrow 0$ ) и при этом происходит смена экспоненциально быстрого спада корреляционной функции с расстоянием  $G(r) \sim \exp(-r/\xi)$  на медленное степенное. В выражении (1)  $d$  — размерность системы,  $\nu$  и  $\eta$  — характеристические показатели (критические индексы) для корреляционной функции.

Аналогичной величиной, характеризующей временные аномальные свойства критических флуктуаций, является автокорреляционная функция:

$$A(t-t') = \langle S(\vec{r}, t) S(\vec{r}, t') \rangle - \langle S(\vec{r}, t) \rangle \langle S(\vec{r}, t') \rangle \propto \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_c(\tau)}\right), \quad (2)$$

$$\tau_c(\tau) \propto |\tau|^{-z\nu} \rightarrow \infty,$$

в которой время корреляции флуктуаций  $\tau_c$  аномально растет с приближением к критической температуре;  $z$  — динамический критический индекс.

Другим аномальным свойством поведения систем при фазовых переходах второго рода является критическое замедление процесса релаксации системы, проявляющееся в медленном изменении со временем характерной термодинамической величины — параметра порядка (намагниченности  $M$  для ферромагнитных систем) при стремлении к состоянию равновесия:

$$M(t) = \langle S(r, t) \rangle \propto \exp\left(-\frac{t}{\tau_r(\tau)}\right), \quad (3)$$

$$\tau_r(\tau) \propto |\tau|^{-z\nu} \rightarrow \infty,$$

где  $\tau_r$  — время релаксации. Поведение ряда физических величин для фазовых переходов второго рода в окрестности  $T_c$  характеризуется набором характеристических показателей: намагниченность  $m(T) \sim (T_c - T)^\beta$ , восприимчивость  $\chi(T) \sim |T_c - T|^{-\gamma}$ , теплоемкость  $C(T) \sim |T_c - T|^{-\alpha}$ , где  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\alpha$  — критические индексы.

Компьютерное моделирование критических явлений дает возможность получения наглядной информации о росте флуктуаций намагниченности и критическом замедлении процессов релаксации в ферромагнитных системах по мере приближения к температуре фазового перехода, о проявлении аномальных свойств в поведении теплоемкости и магнитной восприимчивости (Прудников и др., 2009).

В качестве метода численного исследования макроскопических систем из большого числа частиц применяется метод Монте-Карло, который в настоящее время широко используется для решения различных задач физики, механики, химии, биологии, кибернетики. В статистической физике с помощью метода Монте-Карло получены наиболее значительные достижения, так как метод Монте-Карло, используемый для прямого моделирования естественной вероятностной модели, позволяет довольно просто вычислять средние значения величин в каноническом ансамбле.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО КАНОНИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ

Макроскопические свойства системы определяются свойствами ее возможных микросостояний. Необходимо знать зависимость энергии системы  $E$  от конфигурации  $N$  спинов (в модели Изинга  $S = \pm 1$ )

$$E = -J \sum_{i,j}^N S_i S_j - h \sum_i^N S_i, \quad (4)$$

где первая сумма берется по всем ближайшим соседним парам спинов, а вторая — по всем спинам решетки. Константа обменного взаимодействия  $J$  является мерой силы взаимодействия между ближайшими спинами. При  $J > 0$  реализуется ферромагнитное состояние для  $T < T_c$  с одинаковой ориентацией спинов; при  $J < 0$  — антиферромагнитное состояние для  $T < T_N$  с противоположной ориентацией ближайших спинов.

Большинство физических систем не являются изолированными, а обмениваются энергией с окружающей средой, рассматриваемой как термостат с заданной абсолютной температурой  $T$ . Канонический ансамбль микросостояний такой макроскопической системы частиц определяется вероятностью  $W_n$  того, что система находится в микросостоянии, задаваемом набором квантовых чисел  $n$ , с энергией  $E_n$

$$W_n = \left( \frac{1}{Z} \right) \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right), \quad (5)$$

где  $(1/Z)$  — нормировочный множитель. Так как  $\sum_n W_n = 1$ , то

$$Z = \sum_{n=1}^{N_0} \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right), \quad (6)$$

где  $N_0$  — полное число микросостояний системы;  $Z$  — статистическая сумма. Средняя энергия такой системы определяется выражением:

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n W_n = \left( \frac{1}{Z} \right) \sum_n E_n \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right). \quad (7)$$

### Алгоритм Метрополиса

Так как можно генерировать только ограниченное число  $m$  из полного огромного числа  $N_0$  микросостояний, оценку среднего значения  $\langle A \rangle$  получаем из выражений:

$$\langle A \rangle = \left( \frac{1}{Z} \right) \sum_{n=1}^{N_0} A_n \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right) \cong \frac{\sum_{n=1}^m A_n \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right)}{\sum_{n=1}^m \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right)}, \quad (8)$$

где  $E_n$  и  $A_n$  — полная энергия и значение физической величины  $A$  в конфигурации  $n$ . Используется метод существенной выборки, повышающей статистический вес каждой конфигурации; генерируются конфигурации в соответствии с некоторой функцией распределения вероятностей  $P_n$ . Использование существенной выборки приводит к уменьшению статистической погрешности без

увеличения числа конфигураций. Тогда процедура нахождения среднего аппроксимируется следующим выражением:

$$\langle A \rangle \cong \frac{\sum_{n=1}^m \left( \frac{A_n}{P_n} \right) \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right)}{\sum_{n=1}^m \left( \frac{1}{P_n} \right) \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right)}. \quad (9)$$

Наиболее простой и естественный способ выбора  $P_n$  состоит в использовании самого канонического распределения

$$P_n = \frac{\exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right)}{\sum_n \exp \left( \frac{-E_n}{kT} \right)}, \quad (10)$$

при котором среднее  $\langle A \rangle$  превращается в среднее арифметическое:

$$\langle A \rangle \cong \left( \frac{1}{m} \right) \sum_{n=1}^m A_n. \quad (11)$$

Выбор  $P_n$  в таком виде предложен Метрополисом (1953). Приведем наиболее общую форму алгоритма Метрополиса на примере системы спинов.

1. Формируем начальную (равновесную) конфигурацию.
2. Производим случайное пробное изменение в начальной конфигурации, т. е. случайным образом выбираем какой-нибудь спин и пробуем его опрокинуть.
3. Вычисляем  $\Delta E$ , т. е. изменение энергии системы, обусловленное произведенным пробным изменением конфигурации.
4. Если  $\Delta E \leq 0$ , то принимаем новую конфигурацию и переходим к шагу 8.
5. Если  $\Delta E > 0$ , то вычисляем вероятность перехода  $W = \exp(-\Delta E/kT)$ .
6. Генерируем случайное число  $r$  в интервале  $(0, 1)$ .
7. Если  $r \leq W$ , то принимаем новую конфигурацию, в противном случае сохраняем предыдущую конфигурацию.
8. Определяем значения требуемых физических величин.
9. Повторяем шаги 2–8 для получения достаточного числа конфигураций.
10. Вычисляем средние по конфигурациям, которые статистически независимы.

### Динамическая интерпретация процесса моделирования

Последовательность состояний, задаваемых в алгоритме Метрополиса вероятностью перехода между ближайшими конфигурациями, образует марковский процесс. Можно связать шкалу времени  $t$  со шкалой  $n$  последовательных

конфигураций, считая, что  $N$  случайных выборок узлов системы осуществляется за единицу времени — шаг Монте-Карло на спин (MCs/s). Эволюция неравновесной функции распределения  $P_n(t)$  может быть записана в виде основного уравнения (кинетического уравнения Глаубера):

$$\frac{dP_n}{dt} = -\sum_{n'} W(n \rightarrow n') P_n(t) + \sum_{n'} W(n' \rightarrow n) P_{n'}(t), \quad (12)$$

Для того чтобы при  $t \gg \tau_r$   $P_n(t) \rightarrow P_n = (1/Z) \exp(-E_n/kT)$ , достаточно потребовать выполнения условия детального баланса:

$$W(n \rightarrow n') P_n(t) = W(n' \rightarrow n) P_{n'}(t). \quad (13)$$

Это означает, что отношение вероятностей перехода зависит только от изменения энергии:

$$\frac{W(n \rightarrow n')}{W(n' \rightarrow n)} = \exp\left(\frac{-\Delta E_{nn'}}{kT}\right). \quad (14)$$

Данное соотношение не определяет функцию  $W(n \rightarrow n')$  однозначно. Обычно  $W$  выбирают или как в алгоритме Метрополиса:

$$W(n \rightarrow n') = \begin{cases} \exp\left(\frac{-\Delta E_{nn'}}{kT}\right) & \text{при } \Delta E_{nn'} > 0, \\ 1 & \text{при } \Delta E_{nn'} \leq 0, \end{cases} \quad (15)$$

или в виде функции Глаубера:

$$W(n \rightarrow n') = \frac{\left[1 - \text{th}\left(\frac{-\Delta E_{nn'}}{2kT}\right)\right]}{2} = \frac{\exp\left(\frac{-\Delta E_{nn'}}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(\frac{-\Delta E_{nn'}}{kT}\right)\right]}. \quad (16)$$

Для определения среднего наблюдаемой величины  $A$ , не зависящей от времени явно, запишем соотношение

$$\langle A(t) \rangle = \sum_n A_n P_n(t), \quad (17)$$

которое задает динамическую эволюцию величины  $A$  посредством временной зависимости  $P_n(t)$  — решения уравнения Глаубера. Однако из (17) видно, что данная процедура усреднения эквивалентна усреднению по начальному состоянию  $P_n(t_0)$ , в то время как состояние  $n$ , а следовательно, и  $A$ , изменяется со временем в соответствии с марковским процессом, задаваемым  $W(n \rightarrow n')$ . При этом

$$\langle A(t) \rangle = \sum_n P_n(t_0) A_n(t), \quad (18)$$

что дает процедуру усреднения по последовательности конфигураций в стохастическом марковском процессе.

### Граничные условия

При решении задач статистической физики интерес представляет вычисление характеристик системы в термодинамическом пределе: число частиц  $N \rightarrow \infty$ , объем  $V \rightarrow \infty$ ,  $N/V = \text{const}$ . Компьютерные эксперименты моделируют системы малых размеров по сравнению с термодинамическим пределом. Для уменьшения проявлений эффектов конечности размеров системы осуществляется аппроксимация граничных условий.

Возможные варианты:

- а) периодические граничные условия;
- б) свободная граница;
- в) нестандартные граничные условия;

Периодические граничные условия устраняют влияние поверхностных эффектов и наилучшим образом соответствуют моделированию поведения объемных систем. Они восстанавливают трансляционную инвариантность конечных систем путем наложения условий для любой наблюдаемой величины  $A$ :

$$A(X_i) = A(X_i + L_i), \quad (19)$$

где  $X_i = (X, Y, Z)$ ,  $L_i = (L_1, L_2, L_3)$  — линейные размеры системы.

### Релаксационные свойства модели.

#### Установление состояния равновесия

Алгоритм Метрополиса с динамикой опрокидывания спина для модели Изинга является хорошим приближением к реальной динамике анизотропного магнетика, спины которого связаны с колебаниями решетки. Эта связь приводит к беспорядочному опрокидыванию спинов. Этот стохастический процесс соответствует марковскому процессу, генерируемому методом Монте-Карло в рамках алгоритма Метрополиса. При этом один шаг Монте-Карло на спин пропорционален среднему времени между опрокидываниями спинов, наблюдаемому в реальном физическом эксперименте. Поэтому можно рассматривать динамику опрокидывания спина как настоящий нестационарный процесс и наблюдать релаксацию к равновесию по прошествии достаточно большого числа шагов.

### ХАРАКТЕРИСТИКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ВТОРОГО РОДА

Свойства систем определяются сильными и долгоживущими флуктуациями параметра порядка. Мерой магнитных флуктуаций является корреляционная длина  $\xi(T)$  — линейный размер характерного магнитного домена как области с сильно коррелированными спинами:  $\xi(T) \sim |T - T_c|^{-\nu}$ . Из-за долгоживущих флуктуаций намагнитченности время релаксации системы  $\tau_p$ , а также время корреляции флуктуаций  $\tau$  в окрестности  $T_c$  неограниченно возрастают:  $\tau_p, \tau_c \sim (T - T_c)^{-z\nu}$ , где  $z$  — динамический критический индекс.

Для двумерной модели Изинга существует точное решение, которое дало значения:  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1/8$ ,  $\gamma = 7/4$ ,  $\nu = 1$ ,  $\eta = 1/4$ , расходимость теплоемкости  $C \sim C_0 \ln|T - T_c|$ .

Для трехмерной модели Изинга нет точного решения. Приведем результаты ренорм-группового описания:

$$\alpha = 0,109(4), \beta = 0,3258(14), \gamma = 1,2396(13), \\ \nu = 0,6304(13), \eta = 0,0335(25), z = 2,0168(1).$$

### Эффекты конечных размеров моделируемой системы

В конечной системе исключено проявление настоящего фазового перехода. Можно ожидать, что для  $\xi(T) \ll L$  — линейного размера системы — конечная система будет правильно передавать свойства бесконечной. Зависимость характеристик фазового перехода от размера моделируемой системы представлена на рис. 1, на котором приведены графики, полученные методом Монте-Карло для температурной зависимости теплоемкости (рис. 1а) и восприимчивости (рис. 1б) на один спин для двумерной модели Изинга с  $L = 8, 16, 32, 64$ . Видно, что восприимчивость и теплоемкость обнаруживают максимум, который становится более ярко выраженным для систем с большими  $L$  и испытывает при этом некоторое смещение.

Используется представление, что при  $T = T_c$  критические свойства для систем различного масштаба  $L$  достигаются лишь в пределе  $L \rightarrow \infty$ . Сдвиг температуры перехода конечной системы относительно температуры перехода в бесконечной системе может быть задан как

$$T_c(L) - T_c(L = \infty) \cong aL^{-1/\nu}, \quad L \gg 1, \tag{20}$$

где  $a$  — константа, зависящая от деталей модели и граничных условий.

Вблизи  $T_c$  рост корреляционной длины  $\xi(T)$  ограничивается размером системы, т. е.  $\xi(T) \sim L \sim |T - T_c|^{-\nu}$ . Температурная зависимость намагниченности, теплоемкости, восприимчивости, времени релаксации для конечных  $L$  заменяется на выражения:

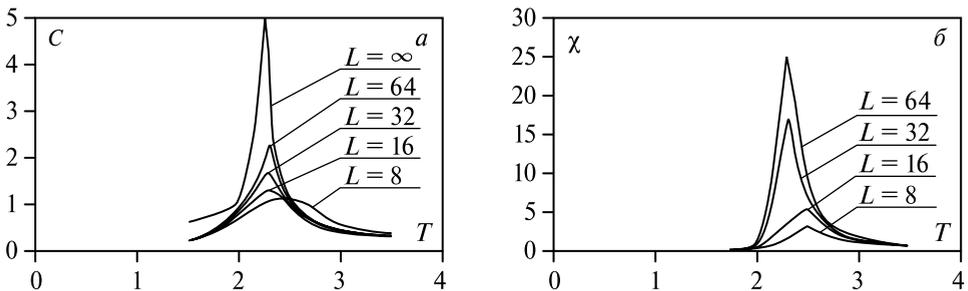


Рис. 1. Графики температурной зависимости теплоемкости  $C(T)$  (а) и восприимчивости  $\chi(T)$  (б) моделируемых двумерных систем с различными размерами  $L$  вблизи температуры фазового перехода

$$\begin{aligned}
 m(T) &\sim (T_c - T)^\beta \rightarrow L^{-\beta/\nu}, & C(T) &\sim |T - T_c|^{-\alpha} \rightarrow L^{\alpha/\nu}, \\
 \chi(T) &\sim |T - T_c|^{-\gamma} \rightarrow L^{\gamma/\nu}, & m(T) &\sim (T_c - T)^\beta \rightarrow L^{-\beta/\nu}.
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Значения критических индексов для трехмерной модели Изинга (результаты компьютерного моделирования):

$$\begin{aligned}
 \alpha &= 0,1118(30), \quad \beta = 0,3265(4), \quad \gamma = 1,2353(25), \\
 \nu &= 0,6294(10), \quad \eta = 0,0374(12), \quad z = 2,04(3).
 \end{aligned}$$

### Моделирование критического поведения неупорядоченных систем

В реальных макроскопических системах всегда имеются те или иные дефекты. Описание влияния дефектов структуры — одна из интересных и сложных проблем теории критических явлений. В ферромагнитном кристалле часть ячеек может быть занята атомами, имеющими нулевой магнитный момент. Если концентрация немагнитных атомов превышает определенную величину, ферромагнетизм полностью подавляется.

Для систем, находящихся вблизи критической точки, даже малое количество дефектов структуры может привести к большим эффектам, существенно изменяя критическое поведение системы и приводя к изменению значений критических индексов.

Дефекты бывают двух видов: расплавленные (равновесные) и замороженные.

1. Если способ приготовления образца таков, что дефекты структуры находятся в равновесии с матрицей системы, то их принято называть расплавленными или равновесными.
2. Как правило, при приготовлении образца дефекты не успевают прийти в термодинамическое равновесие с матрицей и как бы замораживаются в ней в виде некоторой конфигурации, несущей память о способе приготовления системы; такие дефекты принято называть замороженными.

В случае расплавленных дефектов структуры их концентрация играет роль дополнительной термодинамической переменной. Ее влияние на критическое поведение проявляется лишь в сдвиге критической температуры и перенормировке значений критических индексов с фактором  $1/(1 - \alpha)$ , если индекс теплоемкости однородной системы  $\alpha$  положителен (*Fisher*, 1968).

Существуют следующие предсказания ренормгруппового описания для систем с замороженными точечными дефектами (критерий Харриса (*Harris*, 1974)): наличие дефектов структуры оказывается существенным для критического поведения только таких систем, теплоемкость которых в отсутствие дефектов расходится вблизи температуры фазового перехода. В результате только для систем, критическое поведение которых описывается трехмерной или двумерной моделью Изинга, наличие дефектов будет модифицировать их критическое поведение. При этом сохраняется характер фазового перехода второго

рода, но критическое поведение характеризуется новым набором критических индексов, значения которых не зависят от концентрации точечных дефектов в области их малых концентраций. Так, для трехмерной модели Изинга с точечными замороженными дефектами методами ренорм-группы были получены следующие значения критических индексов:

$$\alpha = -0,034(30), \beta = 0,349(5), \gamma = 1,330(17), \\ \nu = 0,678(10), \eta = 0,030(3), z = 2,179(1).$$

Экспериментальные исследования подтвердили численное отличие критических индексов для неупорядоченных систем от их значений для однородных систем и показали хорошее согласие с теоретическими результатами в пределах 5–10 % погрешности измеряемых значений:  $\alpha = -0,09(3)$ ,  $\beta = 0,36(2)$ ,  $\gamma = 1,34(6)$  ( $p = 0,93$ ),  $\gamma = 1,56(16)$  ( $p = 0,5$ ),  $\nu = 0,70(2)$  ( $p = 0,93$ ),  $\nu = 0,76(8)$  ( $p = 0,5$ ),  $z = 2,18(10)$  ( $p = 0,9$ ).

### **Модификация метода Монте-Карло для неупорядоченных систем**

Метод Монте-Карло при процедуре моделирования поведения неупорядоченных систем претерпевает ряд изменений. Рассматривается ферромагнитная неупорядоченная модель Изинга с немагнитными атомами примеси. Атомы примеси при моделировании сопоставляются с пустыми узлами. Спин соответствующего пустого узла полагается равным нулю. Алгоритм Метрополиса при этом сохраняется, как и для однородных систем с учетом того, что вклад в энергию взаимодействия магнитного атома со спином  $S = \pm 1$  с немагнитным атомом со спином  $S = 0$  оказывается равным нулю.

Следует отметить, что для каждой выращенной на решетке примесной конфигурации реализуется алгоритм Метрополиса получения различных термодинамических характеристик системы спинов как величин усредненных по числу шагов Монте-Карло. Однако искомая термодинамическая характеристика неупорядоченной системы получается лишь после дополнительного усреднения получаемых величин для отдельных конфигураций по полному набору выращенных различных примесных конфигураций. При этом значения термодинамических характеристик будут более достоверными с увеличением числа примесных конфигураций, используемых при усреднении.

### **НЕРАВНОВЕСНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СТРУКТУРНО- НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА**

Представления теории фазовых переходов, хорошо разработанные для однородных систем, претерпевают сильные изменения при попытках их распространения на системы со структурным беспорядком. Так, до сих пор остался невыясненным вопрос: являются ли такие характеристики критического поведения, как критические показатели, универсальными, т. е. не зависящими

от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции, или осуществляется непрерывное изменение критических показателей в зависимости от концентрации. Поскольку возможности аналитического теоретического подхода ограничены описанием слабо неупорядоченных систем, исследование проблемы универсальности критического поведения сильно неупорядоченных систем методами компьютерного моделирования имеет большое значение.

Данная работа посвящена изучению влияния неравновесных начальных состояний на эволюцию намагниченности  $m(t)$  ферромагнитной неупорядоченной системы в критической точке. Известно, что аномальные особенности в явлениях критической динамики определяются прежде всего эффектами дальнедействующей корреляции долгоживущих флуктуаций ряда термодинамических переменных. В связи с этим фундаментальный интерес представляет исследование процессов критической релаксации системы из начального неравновесного состояния, созданного, например, при температурах, много больших критической, и характеризуемого поэтому малой корреляционной длиной, в сильно коррелированное состояние при критической температуре. В работе (Janssen et al., 1989) на основе ренорм-группового анализа неравновесного критического поведения спиновой системы с начальным значением намагниченности  $m_0$  было показано, что после микроскопически малого промежутка времени  $t_{mic}$  для  $k$ -го момента намагниченности системы реализуется скейлинговая форма:

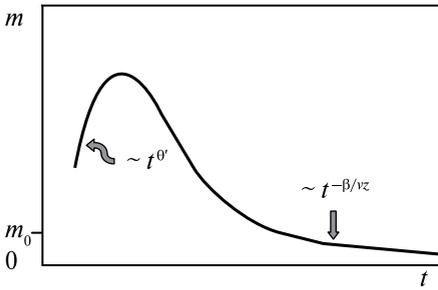
$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0), \tag{22}$$

где  $t$  — время;  $\tau = (T - T_c)/T_c$  — приведенная температура;  $b$  — произвольный масштабный фактор;  $L$  — линейный размер решетки;  $\beta, \nu, z$  — известные критические индексы;  $x_0$  — новый независимый критический индекс, задающий масштабную размерность начального значения намагниченности  $m_0$ . На ранней стадии эволюции системы корреляционная длина еще достаточно мала и конечность размера моделируемой системы оказывается несущественной. Полагая в (22)  $b = t^{1/z}$ , для первого момента намагниченности ( $k = 1$ ) и малой величины  $m_0 t^{1/z}$  получаем следующее выражение:

$$M(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^\theta \left(1 + at^{1/z\nu} \tau\right) + O(\tau^2, m_0^2), \tag{23}$$

где  $\theta = (x_0 - \beta/\nu)/z$ . Для  $\tau \rightarrow 0$  и достаточно малых  $t$  получаем асимптотическое поведение  $M(t) \sim t^\theta$ . Временной интервал увеличения намагниченности  $t_0 \sim m_0^{-z/x_0}$ . С увеличением времени коротковременная динамика увеличения параметра порядка сменяется на привычную долговременную динамику уменьшения параметра порядка со временем по степенному закону  $m(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$  с показателем, определяемым отношением  $\beta/z\nu$  со статическими критическими индексами  $\beta$  и  $\nu$  и динамическим критическим индексом  $z$  (рис. 2).

Вычисление показателя  $\theta$ , характеризующего степенную временную зависимость намагниченности на коротковременном этапе эволюции системы,



**Рис. 2.** Эволюция намагниченности в критической точке из неравновесного начального состояния с малой  $m_0$

было осуществлено в работе (Janssen et al., 1989) методом ренорм-группы в двухпетлевом приближении с применением метода  $\varepsilon$ -разложения. Последующее исследование явления неравновесной критической релаксации трехмерной модели

Изинга в коротковременном режиме методами компьютерного моделирования (Jaster et al., 1999) подтвердило предсказание теории о степенном характере эволюции намагниченности ферромагнитных систем, однако определенное значение показателя  $\theta = 0,108(2)$  находится в неудовлетворительном соответствии с теоретическим значением  $\theta = 0,130$ , получаемым при непосредственной подстановке параметра  $\varepsilon = 1$  для случая трехмерных систем, или значением  $\theta = 0,138$ , найденным при использовании метода Паде-Бореля для суммирования имеющегося очень короткого ряда теории по  $\varepsilon$ . В нашей работе (Прудников и др., 2008) впервые был осуществлен расчет динамического критического индекса коротковременной эволюции  $\theta$  в следующем трехпетлевом приближении ренорм-групповой теории в рамках метода  $\varepsilon$ -разложения и получено значение  $\theta = 0,1078(22)$  при применении метода Паде-Бореля для суммирования трехчленного ряда теории при  $\varepsilon = 1$ , которое находится в хорошем согласии с результатами компьютерного моделирования.

Для структурно неупорядоченной модели Изинга в работе (Oerding, Janssen, 1995) было осуществлено ренорм-групповое описание неравновесного критического поведения и осуществлен расчет показателя  $\theta$  в двухпетлевом приближении с использованием метода  $\varepsilon$ -разложения. Было получено значение  $\theta = 0,087$  при непосредственной подстановке параметра  $\varepsilon = 1$  для случая трехмерных систем.

В данной работе нами осуществлено численное исследование неравновесного критического поведения трехмерной модели Изинга как в области ее слабой неупорядоченности со спиновой концентрацией  $p = 0,80$ , так и в области сильной неупорядоченности с  $p = 0,60$ .

В работе рассматривается модель неупорядоченной спиновой системы в виде кубической решетки с линейным размером  $L = 128$  и наложенными граничными условиями. Микроскопический гамильтониан неупорядоченной модели Изинга задается выражением

$$H = -J \sum_{i,j} p_i p_j S_i S_j, \quad (24)$$

где  $J > 0$  — интеграл обменного взаимодействия между закрепленными в узлах решетки спинами  $S_i$ , принимающими значения  $\pm 1$ . Немagnetные атомы примеси образуют пустые узлы. Числа заполнения  $p_i$  при этом принимают значения 0 или 1 и описываются функцией распределения

$$P(p_i) = (1-p)\delta(p_i) + p\delta(1-p_i), \quad (25)$$

с  $p = 1 - c$ , где  $c$  — концентрация атомов примеси.

Для моделирования спиновых конфигураций в системе был применен алгоритм Метрополиса. Нами была исследована релаксационная динамика системы, описываемая моделью А в классификации моделей критической динамики, проведенной Хоэнбергом и Гальпериным (*Hohenberg, Halperin, 1977*). Алгоритм Метрополиса, реализующий динамику односпиновых переворотов, наилучшим образом соответствует релаксационной модели А и позволяет нам провести сравнение получаемого в результате моделирования критической релаксации системы динамического критического индекса  $z$  с результатами нашего ренорм-группового описания (*Креницын и др., 2006*) критической динамики модели А для систем с пространственно некоррелированным распределением дефектов структуры.

### Исследование влияния начального неравновесного состояния с $m_0 \ll 1$

Для неупорядоченных систем осуществляется численное вычисление временной зависимости  $k$ -го момента намагниченности  $M^{(k)}(t)$  в виде

$$M^{(k)}(t) = \left\langle \left\langle \left( \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) \right)^k \right\rangle \right\rangle, \quad (26)$$

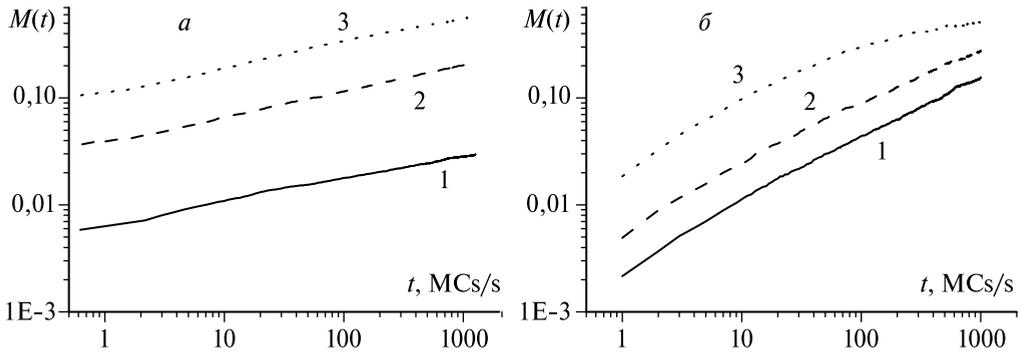
где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по спиновым конфигурациям, а квадратные скобки — усреднение по различным реализациям распределения дефектов структуры в системе при заданной спиновой концентрации  $p$ ,  $N_s = pL^3$  — число спинов в решетке. В данной работе проводилось усреднение вычисляемых величин по 1000 различным примесным конфигурациям для систем с  $p = 0,80$  и по 4000 примесным конфигурациям для систем с  $p = 0,60$  с 25 прогонками для каждой примесной конфигурации. Для независимого вычисления динамических критических индексов  $\theta$  и  $z$ , а также отношения статических критических индексов  $\beta/\nu$  в данной работе на каждом этапе эволюции системы наряду с ее намагниченностью определялись автокорреляционная функция

$$A(t) = \left\langle \left\langle \left( \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} p_i S_i(t) S_i(0) \right) \right\rangle \right\rangle \quad (27)$$

и второй момент намагниченности  $M^{(2)}(t)$ . Их скейлинговый анализ показывает, что при  $m_0 = 0$  и критической температуре  $T = T_c$  данные величины характеризуются степенной зависимостью от времени

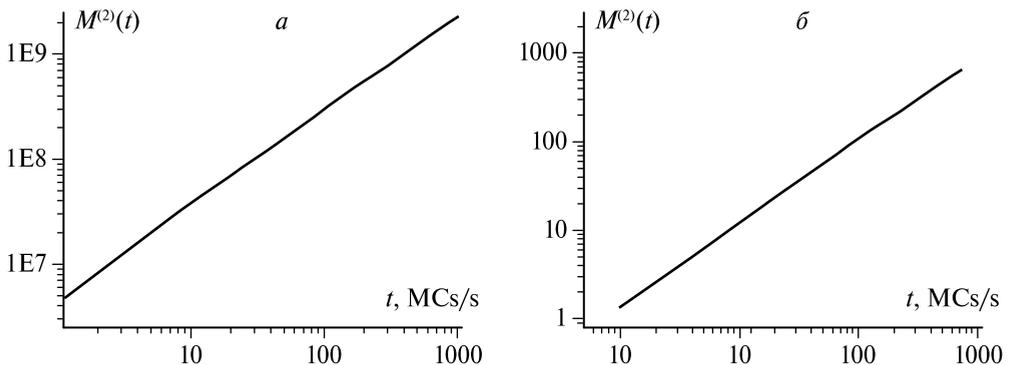
$$A(t) \sim t^{-c_a}, \quad M^{(2)}(t) \sim t^{-c_2}, \quad (28)$$

где  $c_a = d/z - \theta$ ,  $c_2 = (d - 2\beta/\nu)/z$ ,  $d$  — размерность системы.

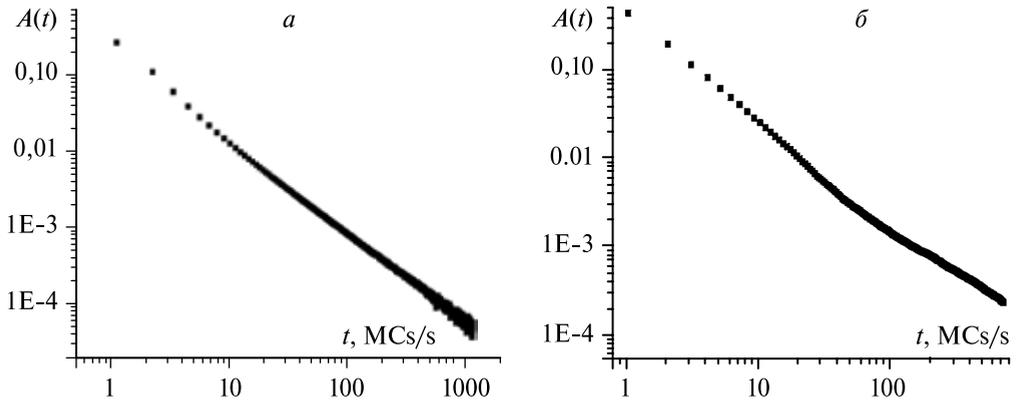


**Рис. 3.** Временные зависимости критического поведения намагниченности для систем с  $p = 0,80$  (а) и  $p = 0,60$  (б) при начальных значениях  $m_0 = 0,01$  (1);  $0,02$  (2);  $0,03$  (3) в двойном логарифмическом масштабе

В настоящей работе осуществлялось моделирование кубических решеток с размерами  $L = 128$  при критических температурах  $T_c = 3,49948$  и  $T_c = 2,42413$  для систем со спиновыми концентрациями  $p = 0,80$  и  $p = 0,60$  соответственно, определенными нами при численных Монте-Карло-исследованиях неупорядоченной модели Изинга в равновесном состоянии (Прудников и др., 2007). Временное поведение намагниченности с начальными значениями  $m_0 = 0,01$ ;  $0,02$  и  $0,03$  исследовалось на временах до  $1000$  MCS. На рис. 3а, б представлены в двойном логарифмическом масштабе усредненные временные зависимости для намагниченностей систем с  $p = 0,80$  (см. рис. 3а) и с  $p = 0,60$  (см. рис. 3б). Они позволяют определять показатели  $\theta(m_0)$  и их асимптотическое значение  $\theta(m_0 \rightarrow 0)$  на основе линейной аппроксимации значений  $\theta(m_0)$  при  $m_0 \rightarrow 0$ . На рис. 4а, б и 5а, б для данных систем, стартующих из неравновесного начального состояния с близким к нулю значением  $m_0 = 0,0001$ , представлены временные зависимости для второго момента намагниченности и автокорреляционной



**Рис. 4.** Временные зависимости критического поведения ( $T = T_c$ ) второго момента намагниченности  $M^{(2)}(t)$  для систем с  $p = 0,80$  (а) и  $p = 0,60$  (б) в двойном логарифмическом масштабе



**Рис. 5.** Временные зависимости критического поведения ( $T = T_c$ ) автокорреляционной функции  $A(t)$  для систем с  $p = 0,80$  (а) и  $p = 0,60$  (б) в двойном логарифмическом масштабе

функции, также изображенные в двойном логарифмическом масштабе. Анализ данных зависимостей позволяет определять значения показателей  $c_a$  и  $c_2$  в соответствии с (28). В слабо неупорядоченных системах с  $p = 0,80$  в отличие от поведения однородных систем может быть выявлено два универсальных динамических критических режима со степенным временным изменением  $M(t)$ ,  $M^{(2)}(t)$  и  $A(t)$ , а именно: на раннем временном интервале  $t = [10, 100]$  осуществляется критическое релаксационное поведение, соответствующее поведению однородной системы и определяемое динамическими критическими индексами  $\theta \cong 0,106(4)$  и  $z \cong 2,03(3)$  с  $\beta/\nu \cong 0,520(9)$ , а лишь затем, при прохождении через режим кроссоверного поведения, в интервале  $t = [300, 800]$  реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы с критическими индексами  $\theta \cong 0,120(16)$ ,  $z \cong 2,185(10)$  и  $\beta/\nu \cong 0,531(18)$ .

Аналогичные процедуры, проведенные для анализа полученных временных зависимостей  $M(t)$ ,  $M^{(2)}(t)$  и  $A(t)$  для сильно неупорядоченной системы со спиновой концентрацией  $p = 0,60$ , выявили, так же как и для слабо неупорядоченной системы, два универсальных динамических критических режима со степенным временным изменением  $M(t)$ ,  $M^{(2)}(t)$  и  $A(t)$ : на раннем временном интервале с  $t = [10, 70]$  осуществляется критическое релаксационное поведение однородной системы, а затем, при прохождении через режим кроссоверного поведения, в интервале  $t = [150, 700]$  реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы с критическими индексами  $\theta \cong 0,186(39)$ ,  $z \cong 2,504(37)$  и  $\beta/\nu \cong 0,524(16)$ .

Сопоставление полученных значений критических индексов для систем с  $p = 0,80$  и  $p = 0,60$  между собой показывает: несмотря на то что значения отношения статических критических индексов  $\beta/\nu$  согласуются друг с другом в пределах статистических погрешностей, отличие значений динамических критических индексов  $\theta$  и  $z$  для слабо- и сильно-неупорядоченных систем значительно превышает статистические погрешности их определения.

Сопоставим полученные значения критических индексов с результатами исследований, проведенных в других работах. Так, найденные нами значения индексов для систем с  $p = 0,80$  находятся в достаточно хорошем соответствии с результатами работ по компьютерному моделированию, где для слабо-неупорядоченных систем были получены значения  $\nu = 0,684(5)$ ,  $\beta = 0,355(3)$  (Ballesteros et al., 1998),  $\nu = 0,683(3)$ ,  $\beta = 0,354(2)$  (Calabrese et al., 2003),  $z = 2,20(8)$  (Прудников, Вакилов, 1992),  $\theta \cong 0,10(2)$  (Schehr, Paul, 2006), а также с результатами теоретико-полевого описания, где были вычислены следующие значения критических индексов:  $\nu = 0,678(10)$ ,  $\beta = 0,349(5)$  (Pelissetto, Vicari, 2000),  $z = 2,1792(13)$  (Криницын и др., 2006),  $\theta \cong 0,087$  (Oerding, Janssen, 1995) ( $\varepsilon$ -разложение, двухпетлевое приближение),  $\theta \cong 0,243(2)$  (Прудников и др., 2009) ( $d = 3$ , двухпетлевое приближение), и результатами экспериментальных исследований изинговских магнетиков, дающих  $\nu = 0,69(1)$ ,  $\beta = 0,350(9)$  (результаты представлены в обзоре (Фольк и др., 2003)),  $z = 2,18(10)$  (Rosov et al., 1992).

Что касается результатов исследований сильно-неупорядоченных систем, то они достаточно противоречивы: результаты одних исследователей направлены на защиту концепции независимости значений критических индексов от концентрации дефектов вплоть до порога перколяции с  $\nu = 0,684(5)$ ,  $\beta = 0,355(3)$  (Ballesteros et al., 1998),  $z = 2,62(7)$  (Parisi et al., 1999),  $\theta = 0,10(2)$  (Schehr, Paul, 2006), получаемыми при некоторой процедуре подгонки промежуточных значений индексов для различных спиновых концентраций с использованием подбираемого индекса поправки к скейлингу  $\omega = 0,370(63)$  (Ballesteros et al., 1998),  $\omega = 0,50(13)$  (Parisi et al., 1999); результаты других исследователей указывают на существование двух универсальных классов критического поведения для слабо-неупорядоченных и сильно-неупорядоченных систем с  $\nu = 0,72(2)$ ,  $\beta = 0,33(2)$  (Heuer, 1990),  $z = 2,53(3)$  (Heuer, 1993),  $\nu = 0,717(7)$ ,  $\beta = 0,313(12)$  (Wiseman, Domany, 1998),  $\nu = 0,725(6)$ ,  $\beta = 0,349(4)$  (Муртазаев и др., 2004),  $\nu = 0,725(4)$ ,  $\gamma = 1,415(11)$  (Прудников и др., 2007),  $z = 2,58(9)$  (Прудников, Вакилов, 1993).

На основе проведенных в данной работе численных исследований критического поведения слабо-неупорядоченных систем со спиновой концентрацией  $p = 0,80$  и сильно неупорядоченных систем с  $p = 0,60$  (табл. 1) можно сделать следующие выводы: данные системы принадлежат к различным универсальным классам с не совпадающими в пределах статистических погрешностей проведенных численных исследований значениями динамических критических индексов  $\theta$  и  $z$ ; полученные значения критических индексов для слабо-неупорядоченных систем находятся в хорошем согласии в пределах статистических погрешностей моделирования и применяемых численных аппроксимаций с результатами теоретико-полевого описания; результатами моделирования критического поведения другими методами, а также согласуются с результатами экспериментальных исследований изинговских неупорядоченных магнетиков. Что же касается значений динамических критических индексов, полученных в данной работе для сильно-неупорядоченной системы с  $p = 0,60$ , то значение индекса  $z \cong 2,504(37)$  согласуется со значениями, полученными в работах (Прудников, Вакилов, 1993; Heuer, 1993), а значение индекса  $\theta \cong 0,186(39)$  носит оригинальный характер.

**Таблица 1.** Значения критических индексов и сравнение их с результатами других работ

Система	$\theta$	$z$	$\beta/\nu$	$\nu$	$\beta$
Однородная, $t \in [10, 100]$	0,106(4)	2,03(3)	0,520(9)		
Слабо-неупорядоченная, $p = 0,8 t \in [300, 800]$	0,120(16)	2,185(10)	0,531(18)		
Сильно-неупорядоченная, $p = 0,6 t \in [150, 700]$	0,186(39)	2,504(37)	0,524(16)		
<i>Ballesteros et al.</i> , 1998				0,684(5)	0,355(3)
<i>Calabrese et al.</i> , 2003				0,683(3)	0,354(2)
<i>Прудников и др.</i> , 1993		2,20(8)			
<i>Schehr, Paul</i> , 2006	0,10(2)				
<i>Прудников и др.</i> , 2006 ( $d = 3$ )		2,1792(13)			
<i>Janssen</i> , 1995 ( $\epsilon$ -разложение)	0,087				
<i>Прудников и др.</i> , 2009 ( $d = 3$ )	0,243(2)				
<i>Прудников и др.</i> , 2008 ( $\epsilon$ -разложение, $p = 1,0$ )	0,1078(22)				
<i>Rosov et al.</i> , 1992 (эксперимент)		2,18(10)			

**Исследование влияния начального  
неравновесного состояния с  $m_0 = 1$**

В этом случае не возникает зависимости характеристик неравновесного критического поведения от нового динамического показателя  $\theta$ . В критической области  $\tau = (T - T_c)/T_c \ll 1$  для временного поведения намагниченности оказывается справедливой следующая зависимость:

$$M(t, \tau) = t^{-\beta/z\nu} M\left(1, t^{1/z\nu} \tau\right) \sim t^{-\beta/z\nu} \left(1 + At^{1/z\nu} \tau + O(\tau^2)\right), \tag{29}$$

где в пределе  $\tau \rightarrow 0$  она приобретает вид

$$M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}. \tag{30}$$

Другой характеристической величиной, определяющей неравновесное критическое поведение, является кумулянт Биндера, характеризуемый выражением

$$U(t) = \frac{M^{(2)}(t)}{(M(t))^2} - 1. \tag{31}$$

Размерный анализ показывает, что в критической точке поведение кумулянта Биндера описывается степенным законом

$$U(t) \sim t^{d/z}, \tag{32}$$

где  $d$  — размерность системы. Представляя (28) в виде

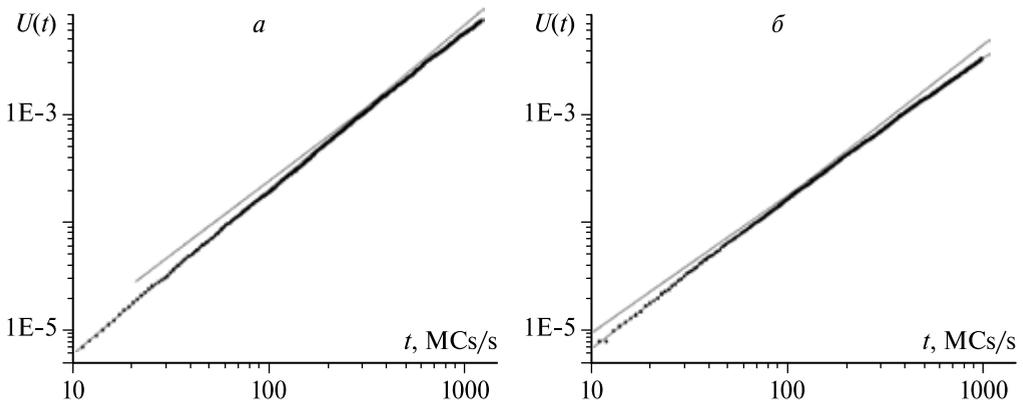
$$\ln M(t, \tau) = (-\beta/z\nu) \ln t + \ln M(1, t^{1/z\nu} \tau)$$

и дифференцируя по  $\tau$ , можно получить соотношение для логарифмической производной намагниченности:

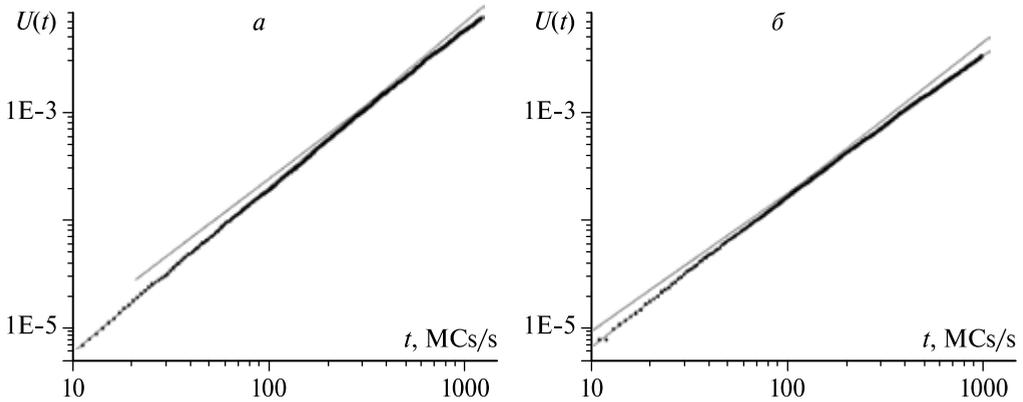
$$\left. \frac{\partial}{\partial \tau} \ln M(t, \tau) \right|_{\tau=0} \propto t^{1/z\nu}. \tag{33}$$

Численное определение намагниченности, ее логарифмической производной и кумулянта Биндера позволяет рассчитать динамический индекс  $z$  и статические индексы  $\beta$  и  $\nu$ .

В настоящей работе осуществлялось моделирование кубических решеток с размерами  $L = 128$  при критических температурах  $T_c = 4,26267$ ,  $T_c = 3,49948$  и  $T_c = 2,42413$  для систем со спиновыми концентрациями  $p = 0,95$ ,  $p = 0,80$  и  $p = 0,60$  соответственно, определенными нами при численных Монте-Карло-исследованиях неупорядоченной модели Изинга в равновесном состоянии (Прудников и др., 2007). Временное поведение намагниченности и кумулянта Биндера исследовалось для слабо-неупорядоченных систем на временах до 1200 MCs, а для сильно-неупорядоченных систем — на временах до 3000 MCs. Проводилось усреднение вычисляемых величин: по 6000 различным примесным конфигурациям для систем с  $p = 0,95$ , по 50 000 примесным конфигурациям для систем с  $p = 0,80$  и по 18 000 примесным конфигурациям для систем с  $p = 0,60$ . Для вычисления логарифмической производной  $\partial_\tau \ln M$  осуществлялся расчет намагниченности для двух температур, смещенных относительно  $T_c$  на

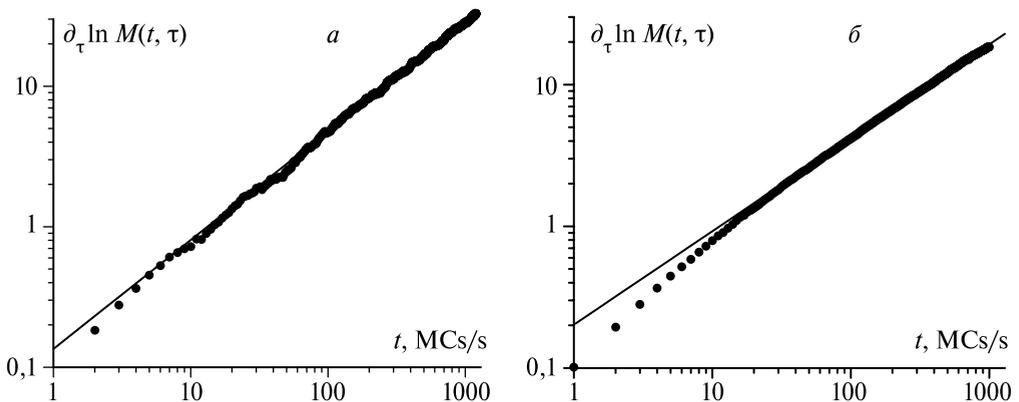


**Рис. 6.** Временные зависимости намагниченности для систем с  $p = 0,95$  (а) и  $p = 0,80$  (б) при температурах  $T_c$  (кривые 1) и  $T_c \pm \Delta T$  (кривые 3 и 2) в двойном логарифмическом масштабе



**Рис. 7.** Временные зависимости критического поведения ( $T = T_c$ ) кумулянта Биндера для систем с  $p = 0,95$  (а) и  $p = 0,80$  (б) в двойном логарифмическом масштабе

интервал  $\Delta T = 0,005$ . На рис. 6а, б представлены в двойном логарифмическом масштабе усредненные временные зависимости для намагниченностей систем с  $p = 0,95$  (см. рис. 6а) и с  $p = 0,80$  (см. рис. 6б) при температурах  $T_c$  и  $T_c \pm \Delta T$ . На рис. 7а, б и 8а, б представлены для данных систем временные зависимости для кумулянта Биндера и логарифмической производной намагниченности также в двойном логарифмическом масштабе. В неупорядоченных системах в отличие от поведения однородных систем может быть выявлено два универсальных динамических критических режима со степенным временным изменением  $M(t)$ ,  $U(t)$  и  $\partial_\tau \ln M(t)$ , а именно: на раннем временном интервале  $t = [20, 200]$  осуществляется критическое релаксационное поведение, соответствующее поведению однородной системы и определяемое динамическим критическим индексом  $z = 2,03(1)$ , а лишь затем, при прохождении через режим кроссоверного



**Рис. 8.** Временные зависимости критического поведения ( $T = T_c$ ) логарифмической производной намагниченности для систем с  $p = 0,95$  (а) и  $p = 0,80$  (б) в двойном логарифмическом масштабе

поведения, в интервале  $t = [250, 950]$  для  $M(t)$  и в интервале  $t = [550, 950]$  для  $U(t)$  и  $\partial_\tau \ln M$  реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы.

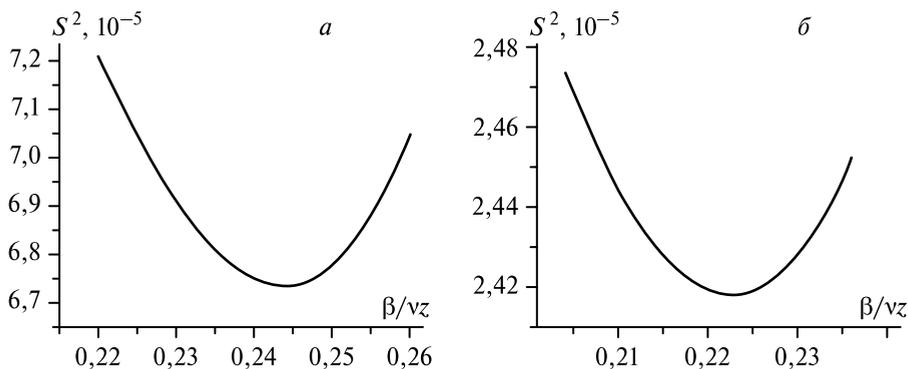
В работе нами были также учтены поправки к асимптотической зависимости измеряемых величин вследствие влияния конечности моделируемых систем, так как только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов в термодинамическом пределе  $L \rightarrow \infty$ . Были применены следующие выражения для временной зависимости наблюдаемых величин  $X(t)$ :

$$X(t) \sim t^\delta \left(1 + A_X t^{-\omega/z}\right), \quad (34)$$

где  $A_X$  — неуниверсальные амплитуды;  $\omega$  — критический индекс поправки к скейлингу; показатель  $\delta = -\beta/\nu z$  в случае  $X = M(t)$ ,  $\delta = d/z$  в случае  $X = U(t)$  и  $\delta = 1/\nu z$  в случае  $X = \partial_\tau \ln M(t)$ .

Чтобы рассчитать значения критических индексов  $\beta/\nu z$ ,  $d/z$  и  $\omega/z$  на временном интервале, соответствующем влиянию структурного беспорядка, был применен метод наименьших квадратов для осуществления наилучшей аппроксимации значений  $M(t)$ ,  $U(t)$  и  $\partial_\tau \ln M(t)$  выражением (34). Процедура заключалась в следующем: 1) временной интервал проявления влияния дефектов структуры разбивался на всевозможные участки  $\Delta t$ , начиная от участков с  $\Delta t = 50$  до участков с  $\Delta t = 550$ ; 2) на каждом участке  $\Delta t$  определялись значения показателя  $\delta$  при фиксированном значении  $\omega/z$ ; 3) найденные значения  $\delta$  усреднялись по выбранным участкам с вычислением среднего значения  $\langle \delta \rangle$  и погрешности аппроксимации  $\Delta \delta$ ; 4) индекс  $\omega/z$  определялся из условия минимальности значений относительных погрешностей проведенных аппроксимаций (рис. 9).

Наряду с аппроксимационной погрешностью  $\Delta \delta$  для показателей  $\delta$  определялась их статистическая погрешность. С этой целью общее количество используемых для усреднения примесных конфигураций делилось на пять групп.



**Рис. 9.** Погрешность аппроксимации намагниченности соотношением (34) при значении  $\omega/z = 0,181$  для систем с  $p = 0,95$  (а) и при значении  $\omega/z = 0,265$  для систем с  $p = 0,80$  (б)

Для каждой из групп вычислялись показатели  $\beta/vz$ ,  $d/z$  и  $1/vz$ , а затем — отклонения от показателей, найденных при использовании усредненных по общему количеству примесных конфигураций значений  $M(t)$ ,  $U(t)$  и  $\partial_t \ln M(t)$ .

В табл. 2 приведены полученные итоговые значения критических показателей  $\beta/vz$  для намагниченности,  $d/z$  для кумулянта Биндера и  $1/vz$  для логарифмической производной намагниченности, соответствующие им суммарные погрешности, а также показатели  $\omega/z$  для этих величин, соответствующие минимальным погрешностям процедуры аппроксимации (35). На основе данных значений показателей были определены для систем с  $p = 0,95$  динамический критический индекс  $z = 2,185(17)$ , отношение статических критических индексов  $\beta/v = 0,533(34)$ , критические индексы  $v = 0,668(22)$ ,  $\beta = 0,356(11)$  и усредненные значения критического индекса поправки к скейлингу  $\omega = 0,369(92)$ , для систем с  $p = 0,80$  значения соответствующих критических индексов  $z = 2,208(22)$ ,  $\beta/v = 0,490(31)$ ,  $v = 0,685(23)$ ,  $\beta = 0,336(10)$  и  $\omega = 0,397(97)$ . Сопоставление полученных значений критических индексов для слабо-неупорядоченных систем показывает, что они принадлежат к одному универсальному классу систем с совпадающими в пределах статистических погрешностей проведенных численных исследований характеристиками критического поведения со средними значениями критических индексов  $z = 2,197(30)$ ,  $v = 0,677(31)$ ,  $\beta = 0,346(20)$ ,  $\beta/v = 0,511(53)$  и  $\omega = 0,383(108)$ . Для сильно-неупорядоченных систем с  $p = 0,60$  значения соответствующих критических индексов  $z = 2,537(45)$ ,  $\beta/v = 0,457(18)$ ,  $\omega = 0,441(7)$ . Эти значения находятся в хорошем согласии в пределах погрешностей со значениями критических индексов, полученными при моделировании критического поведения систем с аналогичными спиновыми концентрациями из начального состояния с  $m_0 \ll 1$ .

Сопоставление полученных значений критических индексов с данными работ по компьютерному моделированию (табл. 3) показывает, что найденные нами значения находятся в достаточно хорошем соответствии с этими результатами, где для слабо-неупорядоченных систем были получены

**Таблица 2.** Значения критических показателей и погрешностей их определения для систем с различными спиновыми концентрациями  $p$

$p$	Показатели	Средние значения	Погрешности аппроксимаций	Статистические погрешности	$\omega/z$
0,95	$\beta/vz$	0,244	0,00011	0,00131	0,234
	$d/z$	1,373	0,00683	0,01542	0,092
	$1/vz$	0,685	0,00117	0,00583	0,181
0,80	$\beta/vz$	0,222	0,00024	0,00087	0,265
	$d/z$	1,359	0,01209	0,01485	0,132
	$1/vz$	0,661	0,02158	0,00700	0,142
0,60	$\beta/vz$	0,180	0,00129	0,00230	0,177
	$d/z$	1,184	0,00612	0,01529	0,171

Табл. 3. Значения критических индексов и сравнение их с результатами других работ

Система	$z$	$\beta/\nu$	$\nu$	$\beta$	$\omega$
Слабо-неупорядоченная, $p = 0,95$	2,185(17)	0,533(7)	0,668(22)	0,356(11)	0,369(92)
Слабо-неупорядоченная, $p = 0,80$	2,208(22)	0,490(6)	0,685(23)	0,336(10)	0,397(97)
Сильно-неупорядоченная, $p = 0,60$	2,537(45)	0,457(18)			0,441(7)
<i>Ballesteros et al.</i> , 1998 ( $p = 0,90-0,40$ )		0,519(8)	0,684(5)	0,355(3)	0,370(63)
<i>Calabrese</i> , 2003 ( $p = 0,80$ )		0,518(5)	0,683(3)	0,354(2)	
<i>Прудников и др.</i> , 2007 $p = 0,95-0,80$ $p = 0,60-0,50$		0,532(12) 0,524(13)	0,693(5) 0,731(11)		0,26(13) 0,28(15)
<i>Прудников и др.</i> , 1993 $p = 0,80$ $p = 0,60$ $p = 0,40$	2,20(8) 2,58(9) 2,65(12)				
<i>Wiseman, Domany</i> , 1998 ( $p = 0,60$ )		0,437(21)	0,717(7)	0,313(12)	
<i>Heuer</i> , 1993 ( $p = 0,60$ )	2,53(3)	0,46(4)	0,72(2)	0,33(2)	
<i>Pelissetto, Vicari</i> , 2000 ( $d = 3$ )		0,515(15)	0,678(10)	0,349(5)	0,25(10)
<i>Прудников</i> , 2006 ( $d = 3$ )	2,1792(13)				
<i>Rosov et al.</i> , 1992 (эксперимент)	2,18(10)				

значения  $\nu = 0,684(5)$ ,  $\beta = 0,355(3)$ ,  $\beta/\nu = 0,519(8)$ ,  $\omega = 0,370(63)$  (*Ballesteros et al.*, 1998),  $\nu = 0,683(3)$ ,  $\beta = 0,354(2)$  (*Calabrese et al.*, 2003),  $\nu = 0,693(5)$ ,  $\gamma = 1,342(7)$ ,  $\omega = 0,26(13)$  (*Прудников и др.*, 2007),  $z = 2,20(8)$  (*Прудников и др.*, 1992), а также с результатами теоретико-полевого описания, где для слабо-неупорядоченных систем были найдены следующие значения:  $\nu = 0,678(10)$ ,  $\beta = 0,349(5)$ ,  $\beta/\nu = 0,515(15)$ ,  $\omega = 0,25(10)$  (*Pelissetto, Vicari*, 2000),  $z = 2,1792(13)$  (*Криницин и др.*, 2006), и результатами экспериментальных исследований изинговских магнетиков, дающих  $\nu = 0,69(1)$ ,  $\beta = 0,350(9)$  (результаты представлены в обзоре (*Фольк и др.*, 2003)),  $z = 2,18(10)$  (*Rosov et al.*, 1992). Полученные нами значения критических индексов для сильно-неупорядоченных систем с  $p = 0,60$  находятся в хорошем соответствии с результатами:  $\nu = 0,72(2)$ ,  $\beta = 0,33(2)$ ,  $\beta/\nu = 0,46(4)$ ,  $z = 2,53(3)$  (*Heuer*, 1993),  $z = 2,58(9)$  (*Прудников, Вакилов*, 1993),  $\nu = 0,717(7)$ ,  $\beta = 0,313(12)$ ,  $\beta/\nu = 0,437(21)$  (*Wiseman, Domany*, 1998).

### Заключение

На основе проведенных в данной работе численных исследований неравновесного критического поведения как слабо-неупорядоченных систем со спиновы-

ми концентрациями  $p = 0,95$  и  $p = 0,80$ , так и сильно-неупорядоченных систем с  $p = 0,60$  можно сделать следующие выводы:

1) метод коротковременной динамики позволяет адекватно описывать критическое поведение структурно-неупорядоченных систем, а полученные значения как статических, так и динамических критических индексов находятся в соответствии с результатами численного исследования подобных систем другими методами;

2) при численном исследовании структурно неупорядоченных систем методом коротковременной динамики в отличие от аналогичных исследований критического поведения однородных систем выявлено два универсальных динамических критических режима со степенным временным изменением измеряемых величин, а именно: на раннем временном интервале осуществляется неравновесное критическое поведение, соответствующее поведению однородной системы, и лишь затем, при прохождении через некоторый интервал кроссоверного поведения, реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы;

3) проведенные численные исследования показали, что критическое поведение слабо- и сильно-неупорядоченных систем принадлежит к различным универсальным классам критического поведения с несовпадающими в пределах статистических погрешностей проведенных численных исследований значениями динамических критических индексов  $\theta$  и  $z$ ;

4) полученные значения критических индексов для слабо-неупорядоченных систем находятся в хорошем согласии в пределах статистических погрешностей моделирования и применяемых численных аппроксимаций с результатами теоретико-полевого описания; результатами моделирования критического поведения другими методами, а также согласуются с результатами экспериментальных исследований слабо-неупорядоченных изинговских магнетиков;

5) значения динамического критического индекса  $z$ , полученные в данной работе для сильно-неупорядоченных систем со спиновой концентрацией  $p = 0,60$  из разных начальных неравновесных состояний, находятся в хорошем согласии друг с другом, а также согласуются со значениями, полученными в работах (Прудников, Вакилов, 1993; Heuer, 1993) другими численными методами, а значение динамического критического индекса коротковременной эволюции намагниченности  $\theta \cong 0,186(39)$  носит оригинальный характер.

Исследования поддержаны грантом 2.1.1/930 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

### Литература

- Креницын А. С., Прудников В. В., Прудников П. В. Расчет динамического критического индекса методом суммирования асимптотических рядов // Теоретич. и мат. физика. 2006. Т. 147. № 1. С. 137–154.
- Муртазаев А. К., Камиллов И. К., Бабаев А. Б. Критическое поведение трехмерной модели Изинга с замороженным беспорядком на кубической решетке // ЖЭТФ. 2004. Т. 126. № 6. С. 1377–1383.

- Прудников В. В., Вакилов А. Н.* Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 55. № 12. С. 709–712; ЖЭТФ. 1993. Т. 103. № 3. С. 962–969.
- Прудников В. В., Вакилов А. Н., Прудников П. В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. М.: Физматлит, 2009.
- Прудников В. В., Прудников П. В., Вакилов А. Н., Криницин А. С.* Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга // ЖЭТФ. 2007. Т. 132. № 2. С. 417–425.
- Прудников В. В., Прудников П. В., Калашников И. А.* Теоретико-полевое описание неравновесной критической динамики структурно неупорядоченных систем // Вестн. Омского ун-та. 2009. № 2. С. 45–50.
- Прудников В. В., Прудников П. В., Калашников И. А., Циркин С. С.* Ренорм-групповое описание процессов неравновесной критической релаксации в коротковременном режиме: трехпетлевое приближение // ЖЭТФ. 2008. Т. 133. № 6. С. 1251–1257.
- Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т.* Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга // УФН. 2003. Т. 173. № 2. С. 175–200.
- Ballesteros H. G., Fernandez L. A., Martin-Mayor V. et al.* Critical exponents of the three dimensional diluted Ising model // Physical Rev. B. 1998. V. 58. P. 2740.
- Calabrese P., Martin-Mayor V., Pelissetto A. et al.* The three-dimensional randomly dilute Ising model: Monte Carlo results // Physical Rev. E. 2003. V. 68. P. 036136.
- Fisher M. E.* Renormalization of critical exponent by hidden variables // Physical Rev. 1968. V. 176. Nr. 1. P. 257–272.
- Harris A. B.* Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C. 1974. V. 7. Nr. 6. P. 1671–1692.
- Heuer H.-O.* Dynamic scaling of disordered Ising systems // J. Phys. A. 1993. V. 26, Nr. 6. P. L341–L346.
- Heuer H.-O.* Monte Carlo simulation of strongly disordered Ising ferromagnets // Physical Rev. B. 1990. V. 42. Nr. 10. P. 6476–6484.
- Hohenberg P. C., Halperin B. I.* Theory of dynamic critical phenomena // Rev. Mod. Phys. 1977. V. 49. P. 435–479.
- Janssen H. K., Schaub B., Schmittmann B.* New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes // J. Phys. B. 1989. V. 73. P. 539–549.
- Jaster A., Mainville J., Schulke L., Zheng B.* Short-time critical dynamics of the 3-dimensional Ising model // J. Phys. A. 1999. V. 32. P. 1395.
- Oerding K., Janssen H. K.* Non-equilibrium critical relaxation in dilute Ising systems // J. Phys. A. 1995. V. 28. P. 4271–4278.
- Parisi G., Ricci-Tersenghi F., Ruiz-Lorenzo J. J.* Universality in the off-equilibrium critical dynamics of the 3d diluted Ising model // Physical Rev. E. 1999. V. 60. P. 5198–5202.
- Pelissetto A., Vicari E.* Randomly dilute spin models: a six-loop field-theoretic study // Physical Rev. B. 2000. V. 62. P 6393.

- Rosov N., Hohenemser C., Eibschutz M.* Dynamic critical behavior of the random-exchange Ising system  $\text{Fe}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{F}_2$  determined via Mӧssbauer spectroscopy // *Physical Rev. B.* 1992. V. 46. Nr. 6. P. 3452–3457.
- Schehr G., Paul R.* Non-equilibrium critical dynamics in disordered ferromagnets // *J. Phys. Conf. Series.* 2006. V. 40. P. 27–35; arXiv:cond-mat/0511571.
- Wiseman S., Domany E.* Self-averaging, distribution of pseudo-critical temperatures and finite size scaling in critical disordered systems // *Physical Rev. Letters.* 1988. V. 81. P. 22–25; *Physical Rev. E.* 1998. V. 58. P. 2938–2951.

**MONTE CARLO SIMULATION OF NONEQUILIBRIUM  
CRITICAL DYNAMICS FOR DISORDERED FERROMAGNETS**

**V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. N. Vakilov, A. S. Krinitsyn, M. V. Rychkov**

*Omsk State University*

Analysis of actuality of simulation methods application for description of the phase transition phenomena in pure and structural disordered systems is given. Monte Carlo simulations of nonequilibrium critical behavior for disordered three-dimensional Ising ferromagnets are carried out in a wide range of point-like defects concentration. The static and dynamic critical exponents are determined for systems starting separately from ordered and disordered initial states. The obtained values of the exponents are compared with results of the field-theoretic description for weakly disordered systems.

## **ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОТЯЖЕННЫХ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ НА КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ КОРОТКОВРЕМЕННОЙ ДИНАМИКИ**

**П. В. Прудников, В. В. Прудников, В. Ю. Колесников,  
М. А. Медведева, П. А. Желтышев**

*Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского  
E-mail: prudnikp@univer.omsk.su*

Дан анализ актуальности численных исследований для описания влияния различных дефектов структуры на поведение систем при фазовых переходах второго рода. Проведено численное исследование методом коротковременной динамики критического поведения различных модельных трехмерных систем с линейными протяженными дефектами в широкой области изменения концентрации дефектов. На примере данных неупорядоченных систем выявлены особенности влияния дальнедействующей корреляции дефектов на неравновесную критическую динамику. Результаты численных расчетов сопоставлены с результатами аналитического теоретико-полевого описания для слабо неупорядоченных систем.

В последние годы много теоретических и экспериментальных работ было посвящено исследованию влияния замороженных дефектов структуры на критическое поведение твердых тел. В большинстве работ исследование ограничивается рассмотрением низкой концентрации дефектов структуры, что позволяет считать эти дефекты и создаваемые ими эффекты типа «случайной локальной температуры» гауссовски распределенными и пространственно-некоррелированными. В то же время вопрос о влиянии на критическое поведение эффектов корреляции дефектов практически не исследован. В рамках этой же проблемы можно поставить вопрос о влиянии на критическое поведение протяженных дефектов, таких как дислокации или плоские дефекты структуры, возникающие, например, на границе зерен. Можно ожидать, что дальнедействующая корреляция в пространственном распределении дефектов может модифицировать критические свойства неупорядоченных систем. В силу этого к моделям систем с дальнедействующей корреляцией дефектов существует несомненный интерес как с общетеоретической точки зрения выявления новых типов критического поведения в неупорядоченных системах, так и с точки зрения реальной возможности проявления дальнедействующей корреляции дефектов в ориентационных стеклах (*Binder, Reger, 1992*), полимерах (*Blavats'ka et al., 2004*) и неупорядоченных твердых телах с дефектами фракталоподобного типа (*Korzhenevskii et al., 1998*).

В 1975 г. Т. Любенским (*Lubensky, 1975*) была выдвинута гипотеза, согласно которой корреляция дефектов должна приводить к исчезновению устойчивой критической точки ренорм-групповых преобразований, что обуславливает раз-

мытие фазового перехода второго рода. Однако в 1980 г. С. Н. Дороговцевым (*Дороговцев, 1980*) была предложена и детально рассмотрена анизотропная модель, в которой дефекты структуры были сильно скоррелированными вдоль параллельных гиперплоскостей с размерностью  $\varepsilon_d$  и случайным образом равномерно распределенными в оставшихся  $d - \varepsilon_d$ -измерениях. При реализации ренорм-группового анализа этой модели величины  $\varepsilon$  и  $\varepsilon_d$  были использованы в качестве малых параметров и было показано, что для  $\varepsilon_d > 0$  существует устойчивая фиксированная точка, приводящая к наличию фазового перехода второго рода с новыми критическими индексами.

Феноменологический подход к описанию универсального критического поведения неупорядоченной системы определяется гамильтонианом  $H$  вида

$$H = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [(\nabla \phi_i)^2 + \tau_0 \phi_i^2 + V(x) \phi_i^2] + \frac{g_0}{4!} \left( \sum_{i=1}^n \phi_i^2 \right)^2 \right\}, \quad (1)$$

где  $\phi(x)$  —  $n$ -компонентный параметр порядка;  $V(x)$  — случайное поле локальной критической температуры, которое характеризует потенциал случайного поля дефектов в точке  $x$  со средним значением по распределению дефектов, равным нулю,

$$\langle\langle V(x) \rangle\rangle = 0. \quad (2)$$

Процедура усреднения свободной энергии системы и корреляционных функций по потенциалу примесей восстанавливает трансляционную инвариантность этих величин, что позволяет применить для дальнейшего исследования критического поведения ренорм-групповую технику. Пространственное распределение дефектов задается через второй момент функции распределения

$$\langle\langle V(x) V(y) \rangle\rangle = u(x - y), \quad (3)$$

где  $u(x)$  — корреляционная функция для случайной локальной температуры фазового перехода, характеризующаяся выражением

$$u(x - y) = \langle\langle T_c(x) T_c(y) \rangle\rangle - \langle\langle T_c(x) \rangle\rangle^2. \quad (4)$$

В простейшем случае некоррелированных точечных дефектов:

$$u(x - y) = \nu \delta^d(x - y), \quad (5)$$

где  $\nu \sim (\text{величина потенциала})^2 \times (\text{концентрация дефектов})$ ;  $d$  — размерность системы.

Модель изотропной неупорядоченной системы с дальнедействующей корреляцией дефектов была предложена А. Вейнрибом и Б. И. Гальпериним в работе (*Weinrib, Halperin, 1983*). В этой модели предполагается, что корреляционная функция случайной локальной температуры убывает с расстоянием по степенному закону

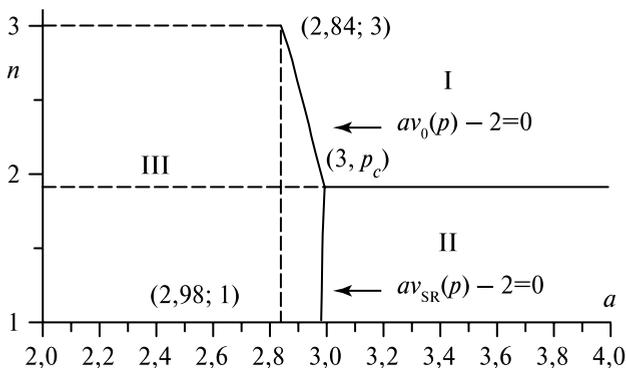
$$u(x - y) \sim |x - y|^{-a}, \quad (6)$$

где  $a$  — параметр корреляции дефектов структуры. В реальных системах такое поведение может реализоваться, если флуктуации  $T_C(x)$  обусловлены рядом внутренних и внешних термодинамических параметров с большой дисперсией характерных пространственных масштабов, когда результирующая корреляционная функция  $u(x)$  могла бы быть аппроксимирована некоторым эффективным степенным законом.

При наличии в системе протяженных дефектов — дислокаций или плоскостей, ориентированных случайным образом, — ее критическое поведение может быть также описано в рамках модели Вейнриба — Гальперина при значении параметра корреляции  $a = d - 1$  или  $a = d - 2$  соответственно.

В работе (Weinrib, Halperin, 1983) был получен критерий существенности дальнедействующей корреляции дефектов для критического поведения неупорядоченной системы с замороженными дефектами структуры. Было показано, что для  $a \geq d$  дальнедействующая корреляция дефектов не сказывается на критическом поведении системы и реализуется обычный критерий Харриса (Harris, 1974)  $2 - d\nu_0 = \alpha_0 > 0$  влияния  $\delta$ -коррелированных точечных дефектов с  $\alpha_0$  и  $\nu_0$  — критическими индексами для теплоемкости и корреляционной длины однородной системы. Для  $a < d$  в работе (Weinrib, Halperin, 1983) был установлен расширенный критерий проявления неупорядоченности системы в ее критическом поведении в виде неравенства  $2 - a\nu_0 > 0$ . В результате более широкий класс неупорядоченных систем, а не только трехмерная модель Изинга, как в случае  $\delta$ -коррелированных дефектов, может характеризоваться новым типом критического поведения.

Проведенное нами в работе (Prudnikov et al., 2000) теоретико-полевое описание критического поведения непосредственно трехмерных систем с дальнедействующей изотропной корреляцией дефектов в двухпетлевом приближении



**Рис. 1.** Области устойчивого типа критического поведения для различных значений параметра корреляции  $a$  и числа компонент параметра порядка  $n$ . I — область устойчивого критического поведения однородных систем, II — неупорядоченных систем с точечными дефектами, III — неупорядоченных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов

с последовательным применением для анализа рядов разложения методов суммирования показало, что получающаяся картина областей устойчивости различных типов критического поведения для значений параметра корреляции, изменяющихся в интервале  $2 \leq a \leq 3$  (рис. 1), существенно отличается от предсказываемых в работе (Weinrib, Halperin, 1983). Проведенный расчет критических индексов для систем с различными значениями параметра корреляции выявил значительное отличие характеристик критического поведения систем с дальнедействующей корреляцией от аналогичных характеристик для однородных систем и систем с  $\delta$ -коррелированными дефектами.

В данной работе для случая с  $a = 2$  методом коротковременной динамики проведено численное исследование трехмерных многокомпонентных систем с линейными дефектами, изотропно ориентированными в образце, и определены для систем с концентрацией спинов  $p = 0,8$  значения динамических и статических критических индексов.

Критическое поведение структурно неупорядоченной спиновой системы с  $n$ -компонентным параметром порядка описывается гамильтонианом:

$$H = -J \sum_{i,j} p_i p_j \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (7)$$

где  $\vec{S}_i$  —  $n$ -мерный единичный вектор в узле  $i$ ;  $J > 0$  характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер;  $p_i$  — случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ( $p_i = 1$ , когда узел  $i$  занят спином, и  $p_i = 0$ , когда узел пуст). Общая спиновая концентрация в системе была выбрана равной  $p = 0,80$ . Полагается, что дальнедействующие эффекты корреляции между точечными дефектами реализуются в виде случайно ориентированных линий с корреляционными характеристиками, спадающими по степенному закону с показателем  $a = 2$ . Для этого был использован следующий способ создания примесных конфигураций: из заполненной спинами трехмерной решетки случайным образом удалялись линии, параллельные осям координат, до достижения заданной концентрации примесей. Для обеспечения изотропности распределения дефектов в кристалле число удаляемых линий в каждом из трех направлений поддерживалось одинаковым.

Для моделирования спиновых конфигураций в системе был применен алгоритм Метрополиса. Нами была исследована релаксационная динамика системы, описываемая моделью А в классификации моделей критической динамики, проведенной Хоэнбергом и Гальпериным (Hohenberg, Halperin, 1977). Алгоритм Метрополиса, реализующий динамику односпиновых переворотов, наилучшим образом соответствует релаксационной модели А и позволяет нам провести сравнение получаемого в результате моделирования критической релаксации системы динамического критического индекса  $z$  с результатами нашего ренорм-группового описания (Prudnikov и др., 2000) критической динамики модели А для систем с пространственно-некоррелированным распределением дефектов структуры.

## МЕТОД КОРОТКОВРЕМЕННОЙ ДИНАМИКИ

Традиционное моделирование методом Монте-Карло критического поведения системы взаимодействующих частиц наталкивается на трудности, связанные в основном с явлением критического замедления, характеризующимся тем, что время релаксации системы, как и время корреляции состояний, неограниченно растет по мере приближения к критической температуре, и степенной характер их асимптотической зависимости от приведенной температуры определяется динамическим индексом  $z$ . Для структурно-неупорядоченных систем эта проблема еще более существенна, так как их неравновесное критическое поведение определяется индексом  $z$ , принимающим большие значения, чем для однородных систем. Для уменьшения эффектов влияния критического замедления применяют кластерные алгоритмы Вольфа (Wolf, 1987) или Свендсена – Ванга (Swendsen, Wang, 1987). Однако эти алгоритмы столь существенно меняют динамику системы по сравнению с алгоритмом Метрополиса, что для получения информации о характеристиках критической динамики их применять нельзя. В связи с этим в данной работе был применен метод коротковременной динамики (МКД) для получения значений как динамического, так и статических критических индексов. Особенностью МКД является то, что информация об универсальном критическом поведении системы может быть получена на относительно малых макроскопических промежутках времени (от 1000 до 2000 шагов Монте-Карло на спин (MCS)) на ранней стадии развития системы в критической точке или ее окрестности.

Метод МКД был обоснован результатами аналитических и численных исследований, проведенных в работах (Janssen et al., 1989; Jaster et al., 1999). Так, в работе (Janssen et al., 1989) на основе ренорм-группового анализа было показано, что после микроскопически малого промежутка времени  $t_{mic}$  для  $k$ -го момента намагниченности системы реализуется скейлинговая форма

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0), \quad (8)$$

где  $t$  — время;  $\tau = (T - T_C)/T_C$  — приведенная температура;  $b$  — произвольный масштабный фактор;  $L$  — линейный размер решетки;  $\beta$ ,  $\nu$ ,  $z$  — известные критические индексы;  $x_0$  — новый независимый критический индекс, задающий масштабную размерность начального значения намагниченности  $m_0$ . Для неупорядоченных систем вычисление  $M^{(k)}(t)$  осуществляется в виде

$$M^{(k)}(t) = \left\langle \left\langle \left( \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} p_i S_i \right)^k \right\rangle \right\rangle, \quad (9)$$

где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по спиновым конфигурациям; квадратные скобки — усреднение по различным реализациям распределения дефектов структуры в системе при заданной спиновой концентрации  $p$ ;  $N_S = pL^3$  — число спинов в решетке.

Начальное состояние системы выбирается обычно либо с  $m_0 \ll 1$ , либо с  $m_0 = 1$ . Исследования показывают, что динамический процесс, начинающийся с полностью упорядоченного состояния ( $m_0 = 1$ ), предпочтительнее из-за меньшего влияния флуктуаций на результаты. Более того, в этом случае не возникает зависимости от нового критического индекса  $\chi_0$ . В данной работе мы для рассчитанного значения критической температуры проводили моделирование как из полностью упорядоченного начального состояния с  $m_0 = 1$ , так и из начального неупорядоченного состояния с  $m_0 \ll 1$ .

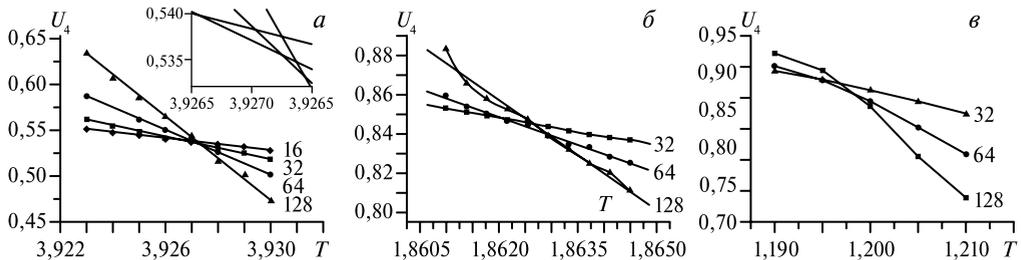
### РАСЧЕТ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

На первом этапе исследований было осуществлено определение критической температуры системы методом кумулянтов Биндера 4-го порядка. Данный кумулянт задается следующим выражением:

$$U_4(L, T) = \frac{1}{2} \left[ 3 - \frac{[\langle M^4 \rangle]}{[\langle M^2 \rangle]^2} \right]. \tag{10}$$

Кумулянт Биндера  $U_4(L, T)$  имеет важную для описания поведения конечных систем скейлинговую форму  $U_4(L, T) = u(L^{1/\nu}(T - T_c))$ , которая позволяет определить критическую температуру  $T_c(L = \infty)$  для бесконечной системы через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость  $U_4(L, T)$  для различных  $L$ . Для уменьшения эффектов критического замедления использовался кластерный алгоритм моделирования Вольфа.

В результате анализа температурного поведения кумулянтов (рис. 2) для кубических решеток с размерами  $L$  от 16 до 128 была определена критическая температура: для трехмерной модели Изинга с линейными дефектами —  $T_c = 3,9281(1)$ , XY-модели —  $T_c = 1,8626(5)$ , модели Гейзенберга —  $T_c = 1,197(2)$ .



**Рис. 2.** Температурные зависимости кумулянта Биндера  $U_4(T, L)$  для трехмерной модели Изинга (а), XY-модели (б) и модели Гейзенберга (в) с линейными дефектами для различных линейных размеров решетки  $L$

**Исследование неравновесной критической релаксации  
трехмерных систем с линейными дефектами из начального  
полностью упорядоченного состояния с  $m_0 = 1$**

В случае моделирования из полностью упорядоченного состояния начальное состояние системы соответствует  $T = 0$  (все спины ориентированы в одном направлении). Используя в (8)  $m_0 = 1$ , а также выбирая фактор  $b = t^{1/z}$ , получим

$$M^{(k)}(t, \tau, L, 1) = t^{-k\beta/z\nu} M^{(k)}\left(1, t^{1/z\nu} \tau, t^{-1/z} L, t^{x_0/z}\right). \tag{11}$$

Для намагниченности ( $k = 1$ ) уравнение (11) для решеток с достаточно большими линейными размерами  $L$  можно переписать в виде

$$M(t, \tau) = t^{-\beta/z\nu} M\left(1, t^{1/z\nu} \tau\right) \sim t^{-\beta/z\nu} \left(1 + At^{1/z\nu} \tau + O(\tau^2)\right), \tag{12}$$

где в пределе  $\tau \rightarrow 0$  оно приобретает вид:

$$M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}. \tag{13}$$

В работе осуществлялся также расчет кумулянта Биндера 2-го порядка, определяемого выражением

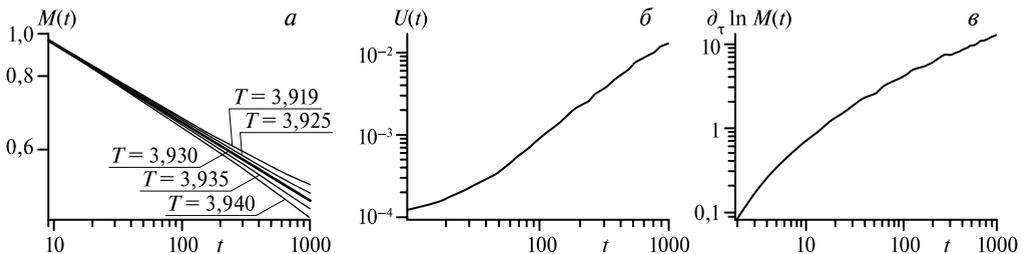
$$U(t) = \frac{M^{(2)}(t)}{(M(t))^2} - 1. \tag{14}$$

Скейлинговый анализ показывает, что в критической точке поведение кумулянта Биндера описывается степенным законом

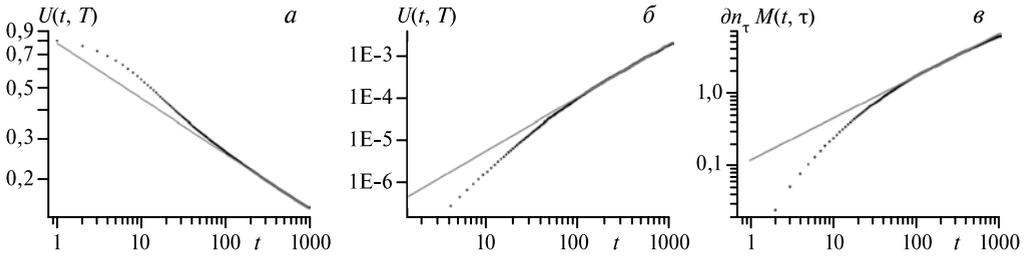
$$U(t) \sim t^{d/z}, \tag{15}$$

где  $d$  — размерность системы.

Представляя (12) в виде  $\ln M(t, \tau) = (-\beta/z\nu) \ln t + \ln M\left(1, t^{1/z\nu} \tau\right)$  и дифференцируя по  $\tau$ , можно получить соотношение для логарифмической производной намагниченности



**Рис. 3.** Временные зависимости намагниченности  $M(t)$  для различных температур (а), кумулянта Биндера 2-го порядка  $U_2(t)$  (б) и логарифмической производной  $\partial_t \ln M(t)$  (в) при критической температуре  $T_c = 3,9281$  для трехмерной модели Изинга с линейными дефектами



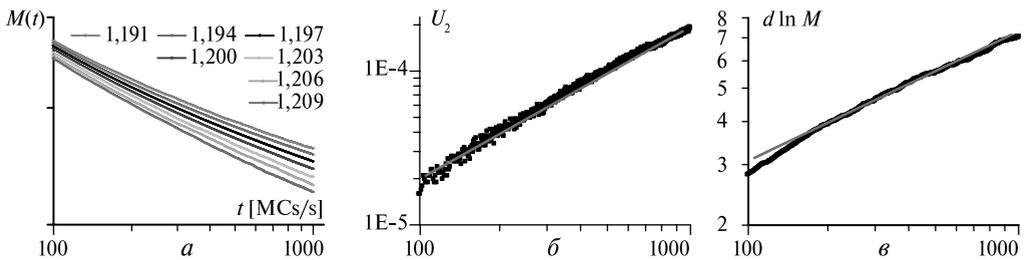
**Рис. 4.** Временные зависимости намагниченности  $M(t)$  (а), кумулянта Биндера 2-го порядка  $U_2(t)$  (б) и логарифмической производной  $\partial_\tau \ln M(t)$  (в) при критической температуре  $T_c = 1,8626$  для трехмерной XY-модели с линейными дефектами

$$\left. \frac{\partial}{\partial \tau} \ln M(t, \tau) \right|_{\tau=0} \propto t^{1/z\nu}. \tag{16}$$

Численное определение намагниченности, ее логарифмической производной и кумулянта Биндера позволяет рассчитать динамический индекс  $z$  и статические индексы  $\beta$  и  $\nu$ .

На рис. 3а–в приведены полученные для трехмерной модели Изинга кривые намагниченности  $M(t)$ , кумулянта  $U_2(t)$  и логарифмической производной намагниченности  $\partial_\tau \ln M(t)|_{\tau=0}$  для образцов с размером решетки  $L = 128$  при  $T_c = 3,9281$ , представленные в двойном логарифмическом масштабе. Зависимость логарифмической производной намагниченности для критической температуры была получена на основе квадратичной интерполяции по трем кривым  $M(t)$  при температурах  $T = 3,9250; 3,9281; 3,9310$ . Результирующие кривые были также получены усреднением по 3000 образцам с различными конфигурациями линейных дефектов.

Анализ зависимости кумулянта  $U_2(t)$  показал, что во временном интервале  $[50, 150]$  MCS степенному характеру зависимости  $U_2(t)$  соответствует значение динамического индекса  $z \approx 2,02$ , описывающее критическое поведение одно-родной модели Изинга, а влияние линейных дефектов начинает проявляться



**Рис. 5.** Временные зависимости намагниченности  $M(t)$  для различных температур (а), кумулянта Биндера 2-го порядка  $U_2(t)$  (б) и логарифмической производной  $\partial_\tau \ln M(t)$  (в) при критической температуре  $T_c = 1,197$  для трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами

лишь на временах  $t > 400$  MCS. Мы учитывали эти выявленные динамические кроссоверные явления также при анализе временных зависимостей намагниченности и ее логарифмической производной.

В работе нами был также осуществлен учет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем, так как только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов в термодинамическом пределе  $L \rightarrow \infty$ . Для этого мы применили следующие выражения для временной зависимости наблюдаемых величин  $X(t)$ :

$$X(t) \sim t^\Delta \left(1 + A_X t^{-\omega/z}\right), \quad (16)$$

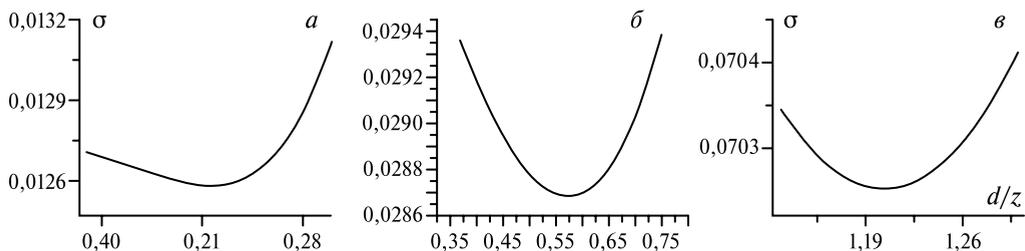
где  $A_X$  — неуниверсальные амплитуды;  $\omega$  — критический индекс поправки к скейлингу; показатель  $\Delta = -\beta/vz$  в случае  $X \equiv M(t)$ ,  $\Delta = d/z$  в случае  $X \equiv U(t)$  и  $\Delta = 1/vz$  в случае  $X \equiv \partial_\tau \ln M(t)$ .

Для расчета значений критических индексов  $\beta/vz$ ,  $d/z$  и  $\omega/z$  на временном интервале, соответствующем влиянию структурного беспорядка, был применен метод наименьших квадратов для осуществления наилучшей аппроксимации значений  $M(t)$ ,  $U(t)$  и  $\partial_\tau \ln M(t)$  выражением (16). Процедура заключалась в следующем: 1) временной интервал проявления влияния дефектов структуры разбивался на всевозможные участки  $\Delta t$ , начиная от участков с  $\Delta t = 50$  до участков с  $\Delta t = 550$ ; 2) на каждом участке  $\Delta t$  определялось значение показателя  $\Delta$  при фиксированном значении  $\omega/z$ ; 3) найденные значения  $\Delta$  усреднялись по выбранным участкам с определением среднего значения  $\langle \Delta \rangle$  и среднеквадратичной погрешности  $\sigma$  этой процедуры аппроксимации; 4) индекс  $\omega/z$  вычислялся из условия минимальности значений среднеквадратичных погрешностей проведенных аппроксимаций (рис. 6). В табл. 1 приведены для трехмерной модели Изинга с линейными дефектами как пример значения показателей  $\beta/vz$ ,  $1/vz$ ,  $d/z$  и минимальные значения среднеквадратичных погрешностей  $\sigma$  аппроксимации при различных значениях критического индекса кроссовера  $\omega$ .

**Таблица 1.** Значения критических индексов и сравнение их с результатами других работ

$\omega$	$\beta/vz$	$\sigma$	$1/vz$	$\sigma$	$d/z$	$\sigma$
0,7	0,2112	0,0100	0,556	0,0053	1,183	0,0100
0,8	0,2096	0,0088	0,559	0,0049	1,205	0,0100
0,9	0,2101	0,0093	0,553	0,0070	1,213	0,0099
1,0	0,2090	0,0095	0,558	0,0072	1,227	0,0098

Итоговые значения критических индексов  $z$ ,  $\beta$  и  $v$  для рассмотренных трехмерных моделей Изинга, XY и Гейзенберга с линейными дефектами приведены в табл. 2. Для сравнения в таблице также представлены значения соответствующих критических индексов, вычисленных в нашей работе [8] в рамках теоретико-полевого подхода. Сопоставление значений показывает их хорошее



**Рис. 6.** Зависимость среднеквадратичных погрешностей аппроксимации  $\sigma$  для временных зависимостей намагниченности  $M(t)$  (а), логарифмической производной намагниченности  $\partial_\tau \ln M(t)|_{\tau=0}$  (б) и кумулянта  $U_2(t)$  (в) как функции показателей  $\beta/vz$ ,  $1/vz$  и  $d/z$  для индекса поправки к скейлингу  $\omega = 0,8$  для модели Изинга с линейными

согласие, особенно для модели Изинга и XY-модели, в пределах статистических погрешностей моделирования и проведенных аппроксимаций. Для модели Гейзенберга большие погрешности для определенных методами компьютерного моделирования критических индексов обусловлены, с одной стороны, гораздо большими сложностями по моделированию состояний этой векторной спиновой модели, а с другой — еще недостаточно достигнутой статистикой для исходных временных зависимостей намагниченности  $M(t)$ , кумулянта  $U_2(t)$  и логарифмической производной намагниченности  $\partial_\tau \ln M(t)|_{\tau=0}$ .

**Таблица 2.** Значения критических индексов и сравнение их с результатами теоретико-полевых расчетов

Модель	Результаты компьютерного моделирования	Результаты теоретико-полевых расчетов ( <i>Prudnikov et al., 2000</i> )
Изинга ( <i>Prudnikov et al., 2007</i> )	$z = 2,489(21)$ $\nu = 0,719(22)$ $\beta = 0,375(45)$	$z = 2,495$ $\nu = 0,716$ $\beta = 0,350$
XY ( <i>Prudnikov et al., 2007</i> )	$z = 2,364(7)$ $\nu = 0,778(26)$ $\beta = 0,37(30)$	$z = 2,365$ $\nu = 0,760$ $\beta = 0,366$
Гейзенберга	$z = 2,91(82)$ $\nu = 0,84(33)$ $\beta = 0,310(85)$	$z = 2,264$ $\nu = 0,798$ $\beta = 0,362$

### Исследование неравновесной критической эволюции трехмерных систем с линейными дефектами из начального состояния с $m_0 \ll 1$

Согласно работе (*Janssen et al., 1989*) для системы, находящейся вблизи температуры фазового перехода второго рода с  $\tau = (T - T_C)/T_C \ll 1$ , ее релаксация из начального состояния, характеризующегося малой намагниченностью  $m_0 \ll 1$ , к равновесному состоянию с  $m=0$  на ранней стадии ее эволюции

с  $m_0 t^{1/z} \ll 1$  носит принципиально другой характер по сравнению с критической релаксацией системы из начального состояния с  $m_0 = 1$ . Так, полагая в (8)  $b = t^{1/z}$ ,  $m_0 t^{1/z} \ll 1$  и пренебрегая влиянием конечности размера  $L$  моделируемой системы, так как на раннем этапе ее эволюции корреляционная длина  $\xi \ll L$ , для намагниченности ( $k = 1$ ) можно получить следующее выражение:

$$M(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^\theta \left( 1 + at^{1/z\nu} \tau \right) + O(\tau^2, m_0^2), \tag{17}$$

где  $\theta = (x - \beta/\nu)/z$ . Для  $\tau \rightarrow 0$  получаем асимптотическое поведение

$$M(t) \sim t^\theta. \tag{18}$$

При этом, как показали ренорм-групповые расчеты (Janssen et al., 1989), а затем и численные исследования методом Монте-Карло (Jaster et al., 1999) однородных систем, показатели  $\theta$  принимают положительные значения, т. е. на раннем этапе эволюции системы ее намагниченность растет со временем. Временной интервал увеличения намагниченности  $t_0 \sim m_0^{-z/x_0}$ . Затем этап коротковременной динамики увеличения намагниченности сменяется на привычную долговременную динамику уменьшения намагниченности со временем по степенному закону  $M(t) \sim t^{-\beta/\nu}$ .

В данной работе для численного выявления влияния эффектов дальнедействующей корреляции дефектов структуры на критическую эволюцию систем на коротковременном этапе наряду с намагниченностью определялись автокорреляционная функция

$$A(t) = \left\langle \left\langle \left( \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} p_i S_i(t) S_i(0) \right) \right\rangle \right\rangle \tag{19}$$

и второй момент намагниченности  $M^{(2)}(t)$ . Их скейлинговый анализ показывает (Jaster et al., 1999), что при  $m_0 = 0$  и критической температуре  $T = T_c$  данные величины характеризуются степенной зависимостью от времени:

$$A(t) \sim t^{-c_a}, \quad M^{(2)}(t) \sim t^{-c_2}, \tag{20}$$

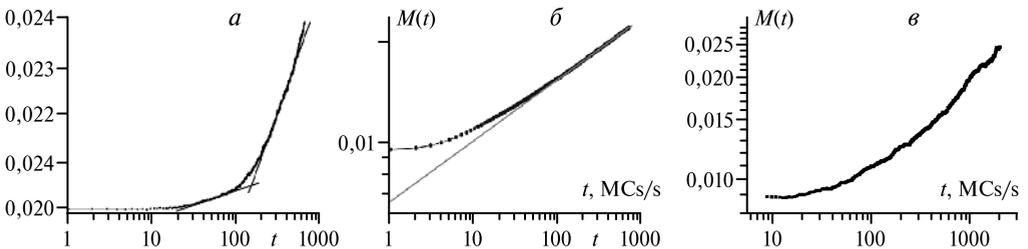
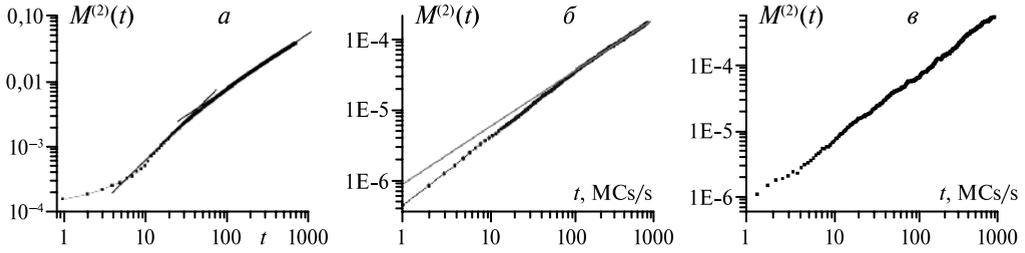


Рис. 7. Временные зависимости намагниченности  $M(t)$  для модели Изинга при  $m_0 = 0,02$  (а), для XY-модели (б) и модели Гейзенберга (с) при  $m_0 = 0,01$

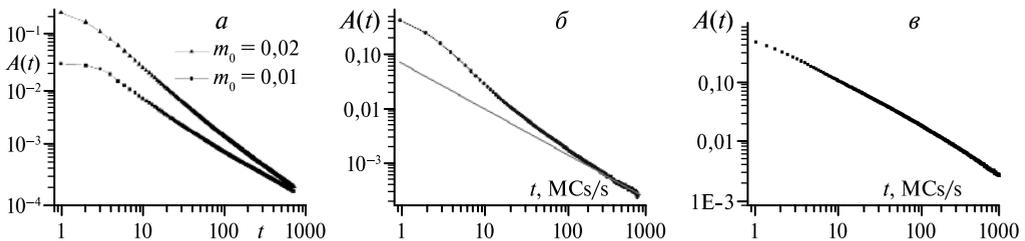


**Рис. 8.** Временные зависимости второго момента намагниченности  $M^{(2)}(t)$  для модели Изинга (а), XY-модели (б) и модели Гейзенберга (в) с линейными дефектами

где  $c_a = d/z - \theta$ ,  $c_2 = (d - 2\beta/v)/z$ ,  $d$  — размерность системы. В настоящей работе для трехмерных моделей Изинга, XY, Гейзенберга с линейными дефектами осуществлялось моделирование кубических решеток с размерами  $L = 128$  при критических температурах  $T_c = 3,9281$  (модель Изинга),  $T_c = 1,8626$  (XY-модель),  $T_c = 1,197$  (модель Гейзенберга) для систем со спиновыми концентрациями  $p = 0,80$ .

Временное поведение намагниченности с начальными значениями  $m_0 = 0,02$  и  $0,001$  для моделей Изинга и Гейзенберга;  $m_0 = 0,01; 0,075$  и  $0,005$  для XY-модели — исследовалось на временах до 1000 MCS. На рис. 7а–в как пример представлены в двойном логарифмическом масштабе усредненные временные зависимости намагниченности для модели Изинга при  $m_0 = 0,02$ , для XY-модели и модели Гейзенберга при  $m_0 = 0,01$ . Они позволяют в соответствии с (17) и полученными зависимостями для других  $m_0$  определять показатели  $\theta(m_0)$  и их асимптотическое значение  $\theta(m_0 \rightarrow 0)$  на основе линейной аппроксимации значений  $\theta(m_0)$  при  $m_0 \rightarrow 0$ . На рис. 8а–в и 9а–в для данных систем представлены временные зависимости для второго момента намагниченности и автокорреляционной функции, также изображенных в двойном логарифмическом масштабе. Анализ данных зависимостей позволяет определять значения показателей  $c_a$  и  $c_2$  в соответствии с (20).

В данных слабо-неупорядоченных системах в отличие от поведения однородных систем может быть выявлено два универсальных динамических



**Рис. 9.** Временные зависимости автокорреляционной функции  $A(t)$  для модели Изинга (а), XY-модели (б) и модели Гейзенберга (в) с линейными дефектами

критических режима со степенным временным изменением  $M(t)$ ,  $M^{(2)}(t)$  и  $A(t)$ , а именно: на раннем временном интервале  $t \approx [10, 100]$  осуществляется критическое релаксационное поведение, соответствующее поведению однородной системы и определяемое динамическими критическими индексами однородной системы ( $\theta \cong 0,101(10)$ ,  $z \cong 2,049(27)$ ,  $\beta/\nu \cong 0,501(27)$  — например, для модели Изинга), а лишь затем, при прохождении через режим кроссоверного поведения, для времени  $t \geq 100-200$  MCS реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы с критическими индексами  $\theta \cong 0,149(11)$ ,  $z \cong 2,517(32)$ ,  $\beta/\nu \cong 0,492(28)$  — для модели Изинга,  $\theta \cong 0,374(11)$ ,  $z \cong 2,342(57)$ ,  $\beta/\nu \cong 0,534(35)$  — для XY-модели,  $\theta \cong 0,471(95)$ ,  $z \cong 2,48(40)$  — для модели Гейзенберга.

**Таблица 3.** Значения критических индексов и сравнение их с результатами теоретико-полевых расчетов

Модель	Результаты компьютерного моделирования	Результаты теоретико-полевых расчетов ( <i>Prudnikov et al., 2000</i> )
Изинга ( <i>Prudnikov et al., 2007</i> )	$z = 2,517(32)$ $\theta = 0,149(11)$	$z = 2,495$
XY ( <i>Prudnikov et al., 2007</i> )	$z = 2,342(57)$ $\theta = 0,374(11)$	$z = 2,365$
Гейзенберга	$z = 2,48(40)$ $\theta = 0,471(95)$	$z = 2,264$

В табл. 3 представлены итоговые значения динамических критических индексов  $\theta$ ,  $z$  для рассмотренных моделей и для сопоставления приведены значения соответствующих критических индексов, вычисленных в работе (*Prudnikov et al., 2000*) в рамках теоретико-полевого подхода. Сравнение значений динамического критического индекса  $z$  показывает их хорошее согласие в пределах статистических погрешностей моделирования и проведенных аппроксимаций, а полученные значения критического индекса  $\theta$  для рассмотренных моделей носят оригинальный характер и могут служить ориентиром для ренорм-групповых вычислений при описании неравновесного критического поведения систем с дальнедействующей корреляцией дефектов.

### Выводы

На основе проведенных в данной работе численных исследований неравновесного критического поведения структурно-неупорядоченных систем с изотропно распределенными линейными дефектами можно сделать следующие выводы:

- 1) получено подтверждение предсказаний ренорм-групповой теории о существенности влияния на критическое поведение систем эффектов дальнедействующей корреляции, которые приводят к реализации нового типа критического поведения, характеризуемого оригинальными значениями как динамических, так и статических критических индексов;

- 2) в отличие от точечных дефектов присутствие протяженных дефектов меняет критическое поведение всех систем, для описания критического поведения которых используются базовые трехмерные теоретические модели — модели Изинга, ХУ и Гейзенберга с многокомпонентным параметром порядка, в то время как некоррелированные точечные дефекты модифицируют критическое поведение только изингоподобных систем;
- 3) метод коротковременной динамики позволяет адекватно описывать критическое поведение структурно-неупорядоченных систем с далекодействующей корреляцией дефектов, а полученные значения как статических, так и динамических критических индексов находятся в хорошем согласии в пределах статистических погрешностей моделирования и применяемых численных аппроксимаций с результатами теоретико-полевого описания данных систем [8] на основе модели Вейнриба–Гальперина;
- 4) при численном исследовании структурно-неупорядоченных систем методом коротковременной динамики в отличие от аналогичных исследований критического поведения однородных систем выявлено два универсальных динамических критических режима со степенным временным изменением измеряемых величин, а именно: на раннем временном интервале осуществляется неравновесное критическое поведение, соответствующее поведению однородной системы, и лишь затем, при прохождении через некоторый интервал кроссоверного поведения, реализуется динамический режим критического поведения неупорядоченной системы.

Исследования поддержаны грантом 2.1.1/930 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

### Литература

- Дороговцев С. Н.* Критические свойства систем с протяженными дефектами. Анизотропия критических индексов // ФТТ. 1980. Т. 22. № 12. С. 3658–3664.
- Binder K., Reger J. D.* Theory of orientational glasses. Models, concepts, simulations // Adv. Phys. 1992. V. 41. Nr. 6. P. 547–627.
- Blavats'ka V., Ferber C., Holovatch Yu.* Polymers in long-range-correlated disorder // Physical Rev. E. 2001. V. 64. P. 0411021–04110210; *Usatenko Z., Ciach A.* Critical adsorption of polymers in a medium with long-range correlated quenched disorder // Physical Rev. E. 2004. V. 70. P. 0518011–05180112.
- Harris A. B.* Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C. 1974. V. 7 Nr. 6. P. 1671–1692.
- Hohenberg P. C., Halperin B. I.* Theory of dynamic critical phenomena // Rev. Mod. Phys. 1977. V. 49. P. 435–479.

- Janssen H. K., Schaub B., Schmittmann B.* New universal short-time scaling behaviour of critical relaxation processes // *J. Phys. B.* 1989. V. 73. P. 539–549.
- Jaster A., Mainville J., Schulke L., Zheng B.* Short-time critical dynamics of the 3-dimensional Ising model // *J. Phys. A.* 1999. V. 32. P. 1395.
- Korzhenevskii A. L., Luzhkov A. A., Schirmacher W.* Critical behavior of crystals with long-range correlations caused by point defects with degenerate internal degrees of freedom // *Physical Rev. B.* 1998. V. 50. P. 3661–3666.
- Lubensky T. C.* Critical properties of random-spin models from the  $\epsilon$ -expansion // *Physical Rev. B.* 1975. V. 11. P. 3573–3580.
- Prudnikov V. V., Prudnikov P. V., Fedorenko A. A.* Static and dynamic critical properties of 3D-systems with long-range correlated quenched defects // *Physical Rev. B.* 2000. V. 62. Nr. 13. P. 8777–8786.
- Prudnikov V. V., Prudnikov P. V., Zheng B., Dorofeev S. V., Kolesnikov V. Yu.* Short-time critical dynamics of the three-dimensional systems with long-range correlated disorder // *Progr. Theor. Phys.* 2007. V. 117. Nr. 6. P. 973–991.
- Weinrib A., Halperin B. I.* Critical phenomena in systems with long-range-correlated quenched disorder // *Physical Rev. B.* 1983. V. 27. P. 413–427.
- Wolf U.* Collective Monte Carlo updating for spin systems // *Physical Rev. Letters.* 1989. V. 62. P. 361–364; *Swendsen R. H., Wang J.-S.* Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations // *Physical Rev. Letters.* 1987. V. 58. P. 86–88.

**NUMERICAL INVESTIGATION OF EXTENDED DEFECTS INFLUENCE  
ON CRITICAL BEHAVIOR OF THREE-DIMENSIONAL SYSTEMS  
BY SHORT-TIME DYNAMICS METHOD**

**P. V. Prudnikov, V. V. Prudnikov, V. Yu. Kolesnikov, M. A. Medvedeva, P. A. Geltyshv**  
*Omsk State University*

Actuality of numerical investigations of structural defects influence on behavior systems during the second type phase transition is discussed. Monte Carlo simulations of the short-time dynamic behavior are reported for three-dimensional model systems with long-range correlated disorder at criticality, in the case corresponding to linear extended defects. The static and dynamic critical exponents are determined for systems starting separately from ordered and disordered initial states. The obtained values of the exponents are compared with results of the field-theoretic description of the critical behavior of these models.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВОЙ ДИНАМИКИ ДВУХСПИНОВОЙ СИСТЕМЫ: ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС

Д. О. Синицын

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, механико-математический факультет. E-mail: d\_sinitsyn@mail.ru*

В работе проводится моделирование динамики квантовой двухспиновой системы. Изучается эволюция волновой функции в условиях магнитного резонанса. Показано, что применение радиочастотного импульса, модулированного по амплитуде, приводит при определенном значении частоты модуляции к параметрическому резонансу, проявляющемуся в изменении характеристик динамики резонансных переходов. Результат может быть использован при разработке методик ядерного магнитного резонанса в жидкости.

### Введение

Исследование динамики спиновых систем под действием магнитных полей мотивировано изучением поведения веществ при применении различных методик ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Базовая конфигурация эксперимента предполагает приложение к образцу постоянного магнитного поля, а также перпендикулярного ему вращающегося (колеблющегося) радиочастотного поля (*Slichter*, 1980), (*Хеберлен, Меринг*, 1980). При условии резонанса это приводит к переходам между энергетическими уровнями системы. В настоящей работе изучается ситуация, когда радиочастотное поле модулируется по амплитуде:  $A(t) = A_0(1 - \varepsilon \cos \nu t)$ . Исследуется динамика в этих условиях системы, состоящей из двух взаимодействующих спинов. Анализ характеристик спиновой динамики приводит к выводу, что при определенном резонансном значении частоты модуляции  $\nu$ , связанном с амплитудой поля  $A_0$ , в системе возникает режим параметрического резонанса. Исходный регулярный периодический процесс переходов между уровнями сменяется более сложной динамикой с переходами, близкими к периодическим, на малом масштабе времени, а также медленным изменением параметров режима переходов. Распределение вероятностей посещения системой ее состояний становится ближе к равномерному. Наблюдается существенное увеличение энтропии этого распределения. Следует отметить, что применение амплитудной модуляции может быть интерпретировано как наложение триплетной формы на радиочастотный импульс в частотном представлении.

Подобный режим был ранее найден для задачи туннелирования частицы в потенциале из двух прямоугольных ям под действием электромагнитного излучения (см. *Golo, Volkov*, 2006). Генерация двухквантовых гармоник в ЯМР изучалась теоретически в работе (*Atsarkin*, 1974) и экспериментально в (*Boscaino*

et al., 1986). Вопросы перехода от регулярной спиновой динамики к нерегулярной рассматривались также в статье (Feldman et al., 1998). В работе (Ермолаева, Шайтан, 1997) анализировались эффекты влияния классических молекулярных движений, приводящих к дрожанию положений энергетических уровней и матричных элементов, на скорости квантовых переходов на примере трехуровневой системы; был обнаружен спектр параметрических резонансов различной интенсивности. Зависимость динамики переходов от формы возбуждающего импульса анализировалась в (Holthaus, 1992), где было показано, что подходящим выбором формы лазерного импульса можно добиться переходов на масштабах времен, гораздо меньших, чем основное время туннелирования.

### ДВУХСПИНОВАЯ СИСТЕМА

Состояния системы из двух спинов представляют собой векторы в пространстве с базисом на основе состояний вида:

$$|\psi\rangle = |\psi^I\rangle \otimes |\psi^II\rangle.$$

Рассмотрим гамильтониан системы двух взаимодействующих спинов, заданный выражением:

$$H^0 = -\gamma_1 \vec{H} \vec{S}^I - \gamma_2 \vec{H} \vec{S}^{II} + J \vec{S}^I \vec{S}^{II}.$$

Здесь параметры  $\gamma_1, \gamma_2$  — гиромагнитные отношения,  $\gamma_1 \neq \gamma_2$ , взаимодействие между спинами задается выражением  $J \vec{S}^I \vec{S}^{II} = J(S_1^I S_1^{II} + S_2^I S_2^{II} + S_3^I S_3^{II})$ , где  $J$  — константа спин-спинового взаимодействия, и рассматривается случай, когда оба спина имеют величину  $1/2$ . Постоянное поле  $\vec{H}$  направлено вдоль оси  $z$ .

Уровни энергии и компоненты соответствующих собственных векторов в стандартном базисе, собственном для  $S_3^I \otimes S_3^{II}$ , выражаются формулами:

$$\begin{aligned} E_0 &= -\frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \hbar + J \frac{\hbar^2}{4}, & |\xi_0\rangle &= (1, 0, 0, 0)^T, \\ E_1 &= -J \frac{\hbar^2}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 \hbar^2 + J^2 \hbar^2}, & |\xi_1\rangle &= (0, \cos \theta, -\sin \theta, 0)^T, \\ E_2 &= -J \frac{\hbar^2}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 \hbar^2 + J^2 \hbar^2}, & |\xi_2\rangle &= (0, \sin \theta, \cos \theta, 0)^T, \\ E_3 &= \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \hbar + J \frac{\hbar^2}{4}, & |\xi_3\rangle &= (0, 0, 0, 1)^T, \end{aligned}$$

где  $\omega_1 = \gamma_1 H$ ;  $\omega_2 = \gamma_2 H$  — ларморовские частоты прецессии ядерных спинов; угол  $\theta$  определяется из условия:

$$\operatorname{tg}(2\theta) = \frac{J\hbar}{\omega_1 - \omega_2}.$$

Соответствующие стационарные решения уравнения Шредингера с гамильтонианом  $H^0$  равны

$$|\psi_j\rangle = e^{-iE_j t/\hbar} |\xi_j\rangle, \quad j = 0, 1, 2, 3.$$

### МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

Динамика системы существенно меняется в случае приложения монохроматического импульса, вращающегося в плоскости, ортогональной к постоянному магнитному полю:

$$V(t) = \gamma_1 A (S_1^I \cos \omega t + S_2^I \sin \omega t) + \gamma_2 A (S_1^{II} \cos \omega t + S_2^{II} \sin \omega t),$$

где  $A = \text{const}$  — величина магнитного поля. Для изучения эволюции волнового вектора в случае наличия возмущения  $V(t)$ , зависящего от времени, используется метод вариации постоянных (*Dirac*, 1927). Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом  $H = H^0 + V(t)$  ищется в виде

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^3 C_j(t) |\psi_j\rangle.$$

После подстановки и умножения обеих частей на  $\langle \psi_k |$  получаем уравнения на  $C_k(t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial C_k}{\partial t} = \sum_{j=0}^3 V_{kj} C_j,$$

которые имеют гамильтонову структуру (*Dirac*, 1927) относительно следующих скобок Пуассона и гамильтониана:

$$\{C_j, C_k^*\} = \frac{\delta_{jk}}{i\hbar}, \quad \{C_j, C_k\} = 0, \quad \{C_j^*, C_k^*\} = 0, \quad j, k = 0, 1, 2, 3,$$

$$F = \sum_{j,k=0}^3 C_j^* V_{jk} C_k.$$

Здесь  $V_{jk}(t) = \langle \psi_j | V(t) | \psi_k \rangle$  — матричные элементы оператора возмущения  $V(t)$  в базисе  $\{|\psi_j\rangle\}$ . Они равны:

$$V_{jk} = K_{jk} A \exp\left\{i\left(\frac{E_j - E_k}{\hbar} - \omega\right)t\right\},$$

$$V_{kj} = V_{jk}^* \quad \text{при } (j, k) = (0, 1), (0, 2), (1, 3), (2, 3),$$

$$V_{jk} = 0 \quad \text{при других } (j, k).$$

Таким образом, переходы подчиняются правилам отбора. Введенные величины  $K_{jk}$  выражаются формулами:

$$K_{01} = \frac{\hbar}{2}(-\gamma_1 \sin \theta + \gamma_2 \cos \theta),$$

$$K_{02} = \frac{\hbar}{2}(\gamma_1 \cos \theta + \gamma_2 \sin \theta),$$

$$K_{31} = \frac{\hbar}{2}(\gamma_1 \cos \theta - \gamma_2 \sin \theta),$$

$$K_{23} = \frac{\hbar}{2}(\gamma_1 \sin \theta + \gamma_2 \cos \theta).$$

В случае совпадения частоты возмущения с ее резонансным значением (для переходов между уровнями 0 и 1)  $\omega_{01} = (E_0 - E_1)/\hbar$  матричные элементы  $V_{01}$  и  $V_{02}$  являются постоянными, в то время как остальные элементы осциллируют с нулевым средним. Если при этом начальные значения  $C_2(0)$  и  $C_3(0)$  равны нулю, то в первом приближении членами с осциллирующими коэффициентами можно пренебречь, а уровни, отличные от нулевого и первого, исключить из рассмотрения (приближение вращающейся волны, (Scully, Zubairy, 1999)). Соответствующие уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial C_0}{\partial t} = K_{01} A C_1, \quad i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} = K_{01} A C_0.$$

Их решение имеет вид:

$$C_0 = \alpha \exp(i \Omega_{01} t) + \beta \exp(-i \Omega_{01} t),$$

$$C_1 = -\alpha \exp(i \Omega_{01} t) + \beta \exp(-i \Omega_{01} t),$$

где  $\Omega_{01} = \frac{K_{01} A}{\hbar}$  — частота резонансных переходов;  $\alpha, \beta$  — комплексные постоянные, определяемые начальными условиями.

Чтобы прояснить физический смысл полученного результата, исследуем динамику вероятностей заполнения уровней энергии и фаз:

$$N_j = |C_j|^2, \quad \varphi_j = \arg C_j.$$

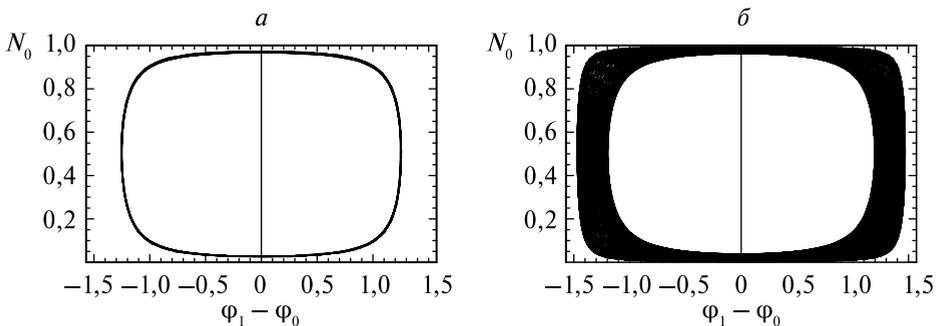
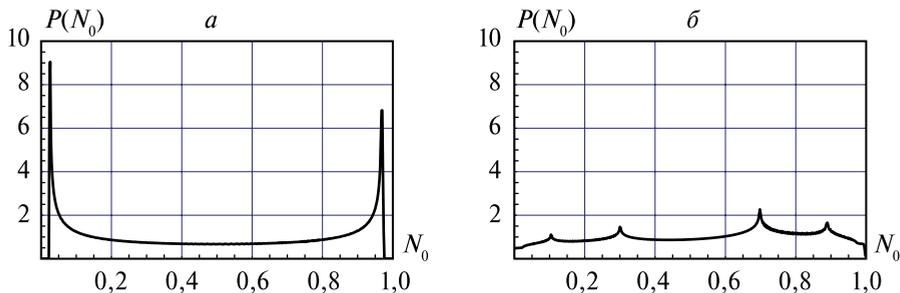


Рис. 1. Траектория в переменных  $\varphi_1 - \varphi_0, N_0$  в отсутствие (а) и при наличии (б) параметрического возбуждения



**Рис. 2.** Частоты посещения состояний с различными значениями  $N_0$  в отсутствие (а) и при наличии (б) параметрического возбуждения

Траектория в переменных  $\phi_1 - \phi_0, N_0$  показана на рис. 1а. Она имеет вид замкнутой линии. Поведение системы состоит в переходах между нулевым и первым уровнями энергии.

Для исследования общего характера наблюдаемой динамики системы целесообразно рассмотрение осредненных по времени характеристик. Такие величины отражают состояния системы, являющиеся преобладающими в целом, на больших интервалах времени. В рассматриваемой задаче в качестве такой характеристики может быть взята частота посещения ею состояния с данным значением  $N_0$ . Плотность этой частоты определяется выражением:

$$P(N_0) = \frac{T(N_0, N_0 + \delta)}{N\delta},$$

где  $T(N_0, N_0 + \delta)$  — время, проведенное системой в состояниях со значениями  $N_0$  в интервале  $(N_0, N_0 + \delta)$ ;  $T$  — период наблюдения ( $\delta$  выбирается достаточно малым, чтобы обеспечить точность приведенного численного приближения производной). На графике  $P(N_0)$  (рис. 2а) кривая имеет форму, характерную для колебательного процесса: плотность частоты (вероятности) пребывания в различных состояниях отлична от нуля только в некотором интервале изменения  $N_0$ , причем имеются пики вблизи краев этого интервала, соответствующие наиболее вероятным состояниям.

### АМПЛИТУДНАЯ МОДУЛЯЦИЯ РАДИОЧАСТОТНОГО ПОЛЯ

Как известно (Holthaus, 1992), характер переходов в системе под действием внешнего поля существенным образом зависит от формы возбуждающего импульса. В настоящей работе рассматривается действие на систему радиочастотного поля, возмущаемого по амплитуде по следующему закону:

$$A(t) = A_0(1 - \varepsilon \cos vt), \quad \varepsilon \ll 1.$$

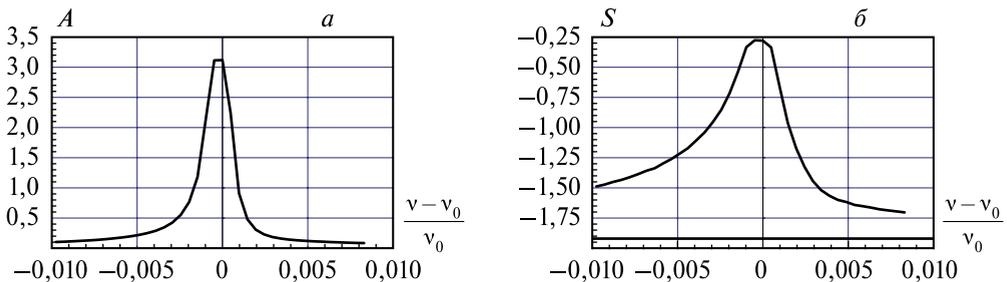
Численное моделирование показывает, что если значение  $\nu$  находится вблизи величины

$$\nu_{res} = 2\Omega_{01} = 2 \frac{K_{01} A_0}{\hbar},$$

то имеет место параметрический резонанс. В этих условиях динамика системы значительным образом изменяется. Траектория в проекции на плоскость  $\varphi_1 - \varphi_0$ ,  $N_0$  имеет вид, показанный на рис. 1б. При отсутствии параметрического возбуждения, а также при модуляции с частотой, далекой от резонансного значения, траектория представляет собой фиксированную замкнутую линию. В случае параметрического резонанса она близка к замкнутой только в масштабе небольшого интервала времени, а на более длительных временах происходят ее периодические расширения и сужения, так что ее размеры (например, разность максимального и минимального значений  $N_0$ ) совершают «колебания» в некоторых пределах. Период этих сужений – расширений более чем на два порядка превышает период движения по замкнутой траектории в нерезонансном случае. В итоге за длительный промежуток времени траектория заметает область, расположенную между наиболее узкой и наиболее широкой локальными замкнутыми кривыми, приближающими траекторию. Эта область имеет форму кольца (см. рис. 1б).

График частот посещения также существенно изменяется (см. рис. 2б): острые пики исчезают, плотность вероятности посещения становится отличной от нуля во всем диапазоне возможных значений  $N_0$ , и распределение приближается к равномерному. Это соответствует нарушению регулярного режима межуровневых переходов с двумя наиболее вероятными значениями  $N_0$ .

Рассмотрим зависимость интенсивности резонансного отклика системы от частоты накладываемого на радиочастотное поле параметрического возбуждения. В качестве характеристики нарушения регулярного режима переходов, соответствующего рис. 1б (в котором траектория в рассматриваемом окне  $\varphi_1 - \varphi_0$ ,



**Рис. 3.** Площадь области, заметаемой траекторией в плоскости  $\varphi_1 - \varphi_0$ ,  $N_0$  (а) и энтропия распределения вероятностей посещения состояний с различными значениями  $N_0$  (б) как функции частоты параметрического возбуждения; горизонтальная линия соответствует значению энтропии без параметрического возбуждения

$N_0$  имеет форму замкнутой линии), естественно рассмотреть площадь, заметаемую траекторией в плоскости  $\varphi_1 - \varphi_0, N_0$ .

График ее зависимости от  $\nu$  показан на рис. 3а. Наблюдается резкое возрастание этой площади в малой окрестности указанного резонансного значения параметрической частоты. В точке максимума область, заметаемая траекторией, приближается к множеству всех возможных значений переменных  $\varphi_1 - \varphi_0, N_0$ .

Важной характеристикой распределения частот посещения состояний является его шенноновская энтропия:

$$S_{Sh} = - \int P(N_0) \ln P(N_0) dN_0,$$

которая служит мерой неопределенности, выражаемой этим распределением (см. Jaynes, 1957). В пике резонанса она значительно увеличивается по сравнению с нерезонансным случаем или случаем отсутствия параметрического возбуждения (рис. 3б). Это свидетельствует о разрушении регулярного поведения системы в наших условиях и о приближении распределения вероятностей посещения состояний к равномерному.

Следует отметить, что найденное резонансное значение частоты параметрического возбуждения, равное удвоенной частоте исходного движения системы, находится в соответствии с критерием Рэля (см. Rayleigh, 1926). В то же время важно, что приближение вращающейся волны, исключающее из рассмотрения уровни 2 и 3, в случае параметрического резонанса дает результаты, аналогичные случаю отсутствия модуляции, не давая указаний на наличие резонанса. Возможно, это свидетельствует о существенности влияния на решение наличия в уравнениях членов с осциллирующими коэффициентами при переменных  $C_2$  и  $C_3$ , несмотря на то что последние остаются малыми по величине (порядка 0,007 по сравнению с 0,7 для  $C_0$  и  $C_1$ ) на протяжении всего периода вычислений.

Таким образом, проведенное численное моделирование показывает, что при воздействии на двухспиновую систему радиочастотного поля, модулируемого по амплитуде, при определенном значении частоты модуляции возникает параметрический резонанс. Значительно увеличивается энтропия распределения вероятностей посещения состояний системы.

При этом важно, что резонансная частота  $\nu_{res}$  параметрического возбуждения зависит от амплитуды  $A_0$  радиочастотного поля:

$$\nu_{res} = 2 \frac{K_{01} A_0}{\hbar}.$$

Для малых значений этой амплитуды структура возбуждающего импульса может быть интерпретирована как триплет, а именно один высокий пик на основной частоте  $\omega_{01} = (E_0 - E_1) / \hbar$  и два побочных пика меньшей величины на частотах  $\omega_{01} \pm \nu_{res}$ . Изучение влияния на рассматриваемое явление релаксационных эффектов станет предметом отдельного исследования.

Автор признателен В. Л. Голо за постоянное внимание к этой работе.

## Литература

- Ермолаева М. Д., Шайтан К. В.* Динамическая модуляция квантовых биений и скорости переходов в трехуровневой системе // Изв. РАН. Сер. «Физика». 1997. Т. 69. № 9. С. 1673–1679.
- Хеберлен У., Меринг М.* ЯМР высокого разрешения в твердых телах. М.: Мир, 1980.
- Atsarkin V. A.* // *Physics Letters. A.* 1974. V. 48. Iss. 6. P. 485–486.
- Boscaino R., Gelardi F. M., Messina G.* // *Physical Rev. B.* 1986. V. 33. Iss. 5. P. 3076–3082.
- Dirac P. A. M.* The quantum theory of emission and absorption of radiation // *Proc. Royal Society. Ser. A.* 1927. V. 114. P. 243.
- Fel'dman E. B., Bruschiweiler R., Ernst R. R.* // *Chemical Physics Letters.* 1998. V. 294. Iss. 4-5. P. 297–304.
- Golo V. L., Volkov Yu. S.* Chaotic driven tunneling in rectangular double-well // *Communications in Computational Physics.* 2006. V. 1. Nr. 1. P. 81–99.
- Golo V. L., Volkov Yu. S.* Russian Chaotic tunneling in a laser field // *Письма в ЖЭТФ.* 2005. Т. 82. №. 4. P. 200–203.
- Holthaus M.* Pulse-shape-controlled tunneling in a laser field // *Physical Rev. Letters.* 1992. V. 69. Iss. 10. P. 1596–1599.
- Jaynes E. T.* Information theory and statistical mechanics // *Physical Rev.* 1957. V. 106. Iss. 4. P. 620–630.
- Rayleigh J. W.* The theory of sound. L.: McMillan, 1926.
- Scully M. O., Zubairy M. S.* Quantum optics. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- Slichter C. P.* Principles of Magnetic Resonance. Berlin; Heidelberg; N. Y.: Springer-Verlag, 1980.

SIMULATION OF THE QUANTUM DYNAMICS OF A TWO-SPIN SYSTEM:  
PARAMETRIC RESONANCE

D. Sinitsyn

*Lomonosov Moscow State University, Faculty of Mechanics and Mathematics*

In the present work, simulation of the dynamics of a two-spin system is performed. The evolution of the wave function in the conditions of magnetic resonance is studied. It is shown that the application of a radio-frequency pulse with amplitude modulation at a certain value of the modulation frequency leads to parametric resonance, the characteristics of the resonance transitions dynamics changing substantially as compared to the case of a monochromatic RF pulse. The result can be used in the development of methods of nuclear magnetic resonance in liquids.

## СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие .....	3
<i>Л. Н. Щур, М. А. Новотный</i> Эволюция горизонта времен при параллельном моделировании дискретных событий .....	6
<i>Л. Ю. Бараш, Л. Н. Щур</i> Гиперболические автоморфизмы тора и генераторы псевдослучайных чисел. Реализации на основе команд SSE .....	14
<i>А. Н. Якунчиков, В. Л. Ковалёв</i> Прямое численное моделирование некоторых физико-химических процессов и явлений .....	30
<i>В. Л. Ковалёв, А. А. Крупнов, М. Ю. Погосбекян, Л. П. Суханов</i> Моделирование адсорбции атомов кислорода на поверхности $Al_2O_3$ методом функционала плотности .....	39
<i>М. Ю. Погосбекян, В. Л. Ковалёв</i> Моделирование гетерогенных каталитических процессов с использованием вычислительного комплекса MD-trajectory .....	51
<i>А. А. Чернышов, К. В. Карельский, А. С. Петросян</i> Метод крупных вихрей для исследования космической и астрофизической плазмы .....	63
<i>А. С. Петросян, К. В. Карельский, И. В. Смирнов</i> Трёхмерная модель обтекания сложной подстилающей поверхности атмосферным течением, нагруженным твердой примесью .....	124
<i>В. Лебедев, А. Черных</i> Структура пассивного скаляра в периферийной области случайного потока . . .	144
<i>А. Г. Славин, К. В. Карельский, А. С. Петросян</i> Моделирование течений мелкой воды над произвольной подстилающей поверхностью .....	153
<i>К. В. Карельский, А. С. Петросян, А. Г. Славин</i> Численное моделирование течений вращающейся мелкой воды .....	178
<i>Л. Ю. Бараш, Л. Н. Щур, В. М. Винокур, Т. П. Бигиони</i> Испарение и гидродинамика лежащей на подложке капли капиллярного размера .....	217
<i>А. Ю. Меньшутин, Л. Н. Щур</i> Критические явления при росте двумерных структур .....	225
<i>В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницын, М. В. Рычков</i> Компьютерное моделирование неравновесной критической динамики структурно-неупорядоченных ферромагнетиков .....	240
<i>П. В. Прудников, В. В. Прудников, В. Ю. Колесников, М. А. Медведева, П. А. Желтышев</i> Численное исследование влияния протяженных дефектов структуры на критическое поведение трехмерных систем методом коротковременной динамики .....	264
<i>Д. О. Синицын</i> Моделирование квантовой динамики двухспиновой системы: параметрический резонанс .....	279

Научное издание

**Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках**  
**Выпуск 1. Вычислительная физика**  
**Таруса, 11–13 февраля 2009 года**

*Под редакцией Р. Р. Назирова*

Зав. ред. *Игнатова Е. С.*

Ведущий редактор *Климкин М. С.*

Корректор *Юрьева В. И.*

Художник *Терехова Г. Д.*

Компьютерная верстка *Комаровой Н. Ю.*

Директор издательства *Чепыжов В. В.*

Подписано в печать 17.08.2009.

Формат 70×100/16. Бумага офсетная.

Гарнитура Newton. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 23,40. Тираж 100 экз. Заказ №

ООО «Издательство «КДУ», 119234, а/я 587.

Тел./факс: (495) 939-57-32, 939-40-51.

E-mail: [kdu@kdu.ru](mailto:kdu@kdu.ru) [Http://www.kdu.ru](http://www.kdu.ru)

Отпечатано в типографии КДУ

Тел./факс: (495) 939-40-36.

E-mail: [press@kdu.ru](mailto:press@kdu.ru)