

УДК 519.63

**ПРОГРАММНАЯ ПЛАТФОРМА ТЕМЕТОС И ЕЁ ПРИМЕНЕНИЕ
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ**© 2023 М. П. Галанин^a, В. В. Лукин^b, А. С. Родин^c*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН,
Миусская пл., 4, г. Москва 125047, Россия*E-mails: ^agalan@keldysh.ru, ^bvvlukin@gmail.com, ^crals@bk.ruПоступила в редакцию 08.08.2023 г.; после доработки 27.10.2023 г.;
принята к публикации 15.11.2023 г.

Платформа Теметос разработана для проведения вычислительного эксперимента на всех стадиях анализа и исследования моделей механики сплошной среды. Разработан модуль для изучения напряжённо-деформированного состояния системы тел с учётом неупругих деформаций и контактного взаимодействия. Он применён для анализа тепловыделяющего элемента, включавшего до 100 топливных таблеток и оболочку. Решатели платформы применены к задачам астрофизики. Построены модели образования аккреционных дисков в двойных звёздных системах, позволяющие интерпретировать наблюдательные результаты.

Ключевые слова: математическое моделирование, программная платформа Теметос, механика сплошной среды, вычислительный эксперимент.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2023.26.402

ВВЕДЕНИЕ

Математическое моделирование состояния сплошной среды, находящейся под действием различных сил, является важным методом решения многих фундаментальных и прикладных задач. В центре внимания при этом находятся вопросы, связанные с разработкой эффективных, высокоточных и надёжных численных методов, а также с исследованием математических моделей и решением задач научной и инженерной практики.

В то же время для интерпретации результатов моделирования, выяснения уровня адекватности модели реальному объекту важно оснастить исследователя средствами визуализации на каждом этапе вычислительного эксперимента. Это касается конструирования, подготовки модели к расчёту, а также этапа анализа результатов расчётов. Последний должен быть организован так, чтобы позволить провести непосредственное сопоставление результатов расчётов с данными наблюдений в натурном эксперименте.

Целью разработки программной платформы Теметос [1, 2] является сопровождение вычислительного эксперимента на всех стадиях анализа и исследования математических моделей физических процессов и технических объектов. Платформа Теметос предоставляет интерфейсы задания геометрической и физической моделей исследуемой конструкции или физического процесса и позволяет оснастить проблемно-ориентированный решатель инструментами подготовки, проведения и анализа результатов вычислительного эксперимента. Интерфейсы платформы включают инструменты работы с геометрическими моделями расчётных областей, сетками, физическими таблицами и зависимостями свойств сред и материалов, начальными и граничными условиями, настройками численных методов и расчётных программ-решателей.

Платформа содержит ряд служебных модулей для подготовки, запуска и анализа результатов расчётов на супер-ЭВМ, включая визуализацию полученного решения. В частности, она позволяет запускать параллельную расчётную программу на удалённом управляющем узле вычислительного кластера, в то время как подготовка расчёта и анализ его результатов выполняются на рабочей станции оператора платформы.

Физическому наполнению платформы Теметос соответствуют разработанные вычислительные модули, ориентированные на конкретный класс задач. В качестве таких модулей разработаны независимые расчётные параллельные программные комплексы, предназначенные для численного решения многомерных задач механики твёрдого деформируемого тела с использованием метода конечных элементов, уравнений Максвелла в квазистационарном приближении конечно-разностными и конечно-элементными методами [2], системы уравнений магнитной газовой динамики с использованием разрывного метода Галеркина.

В разделе 1 данной статьи описан термомеханический модуль, позволяющий производить моделирование твэлов ядерных реакторов. Реализованные в данном модуле вычислительные алгоритмы дали возможность исследовать состояние участка твэла, включающего в себя до 100 топливных таблеток, с учётом значительного изменения итоговой конфигурации контактных поверхностей относительно начального состояния.

В разделе 2 рассмотрена задача моделирования кривых блеска двойных звёздных систем. Программы-решатели, включённые в состав платформы, позволяют проводить моделирование и прямое сопоставление результатов исследования двойных звёзд как с усреднёнными наблюдательными данными, так и с индивидуальными кривыми. Такой подход в силу сложности решения трёхмерных нестационарных задач позволяет получать существенно новые результаты.

Несмотря на существенные различия областей применения платформы Теметос, в обоих случаях используются общие архитектурные решения построения программных комплексов, общие стандарты хранения и передачи данных.

1. ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО МОДУЛЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ УЧАСТКА ТВЭЛА

Разработан термомеханический модуль для платформы Теметос, предназначенный для моделирования напряжённо-деформированного состояния системы тел с учётом образования различных неупругих деформаций и контактного взаимодействия тел между собой.

Данный модуль использован для моделирования термомеханического состояния участка тепловыделяющего элемента (твэла), который занимает множество $G = \bigcup_{\alpha=1}^N G_{\alpha}$ с границей ∂G ($\bar{G} = G \cup \partial G$). Множество G представляет собой участок цилиндрической оболочки G_N , внутри которой расположен столб из одинаковых цилиндрических топливных таблеток G_1, \dots, G_{N-1} , имеющих внутреннее отверстие и фаски на обоих торцах. Участок расчётного множества, соответствующий половине продольного сечения и включающий в себя половины двух таблеток и кусок оболочки, приведён ниже на рис. 1–2.

В начальной конфигурации твэла между таблетками и оболочкой, как правило, существует зазор. При нагревании таблетки расширяются, зазор уменьшается, а затем чаще всего происходит механический контакт между таблетками и оболочкой. Условия теплообмена существенно зависят от деформаций тел в твэле, поэтому тепловая и механическая задачи являются связанными и их нужно решать вместе.

Тепловая задача включает в себя уравнение теплопроводности [3]:

$$c(\mathbf{x}, T) \frac{\partial T}{\partial t} = (\lambda_{ij}(\mathbf{x}, T) T_{,j})_{,i} + \phi(\mathbf{x}, t), \quad (\mathbf{x}, t) \in G \times (0, t_M]. \quad (1)$$

Здесь x_i — компоненты радиус-вектора \mathbf{x} , t — время, $T(\mathbf{x}, t)$ — температура, $T_{,j} = \frac{\partial T}{\partial x_j}$, $\lambda_{ij}(\mathbf{x}, T)$ — компоненты тензора теплопроводности среды, $\phi(\mathbf{x}, t)$ — мощность внутренних источников (стоков) тепла, $c(\mathbf{x}, T)$ — объёмная теплоёмкость среды.

Уравнение (1) дополняется начальным условием и граничными условиями: на разных поверхностях могут быть заданы условия 1, 2 и 3 рода, а также условия идеального или неидеального теплового контакта.

Механическая задача включает в себя уравнения равновесия системы деформируемых тел в каждый момент времени для каждого тела α ($\alpha = 1, \dots, N$, $i, j = \overline{1, 3}$) [3]:

$$\sigma_{ji,j}(\mathbf{u}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in G_\alpha. \quad (2)$$

Уравнения (2) дополняются граничными условиями: кинематическими или силовыми.

В рассматриваемой задаче использован линейный тензор полных деформаций

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2}(u_{i,j}(\mathbf{x}, t) + u_{j,i}(\mathbf{x}, t)), \quad \mathbf{x} \in G_\alpha; \quad (3)$$

и определяющее уравнение (закон Гука), связывающее приращения компонент тензора напряжений с приращениями компонент различных деформаций [3],

$$d\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) = C_{ijkl}(d\varepsilon_{kl}(\mathbf{x}, t) - d\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{x}, t)), \quad \mathbf{x} \in G_\alpha. \quad (4)$$

Здесь $d\varepsilon_{kl}^0$ — компоненты тензора неупругой деформации; u_i — компоненты вектора перемещения; C_{ijkl} — компоненты тензора упругих постоянных.

Различные тела контактируют друг с другом, всего в конструкции есть q пар потенциально контактирующих поверхностей ($\Gamma_{c,1}^k, \Gamma_{c,2}^k$), $k = 1, \dots, q$. Будем использовать обозначение $\Gamma = \bigcup_{k=1}^q (\Gamma_{c,1}^k \cup \Gamma_{c,2}^k)$. При постановке на контактных границах условия скольжения без трения дополнительные граничные условия на $\Gamma_{c,1}^k$ состоят из следующих соотношений (для границы $\Gamma_{c,2}^k$ можно записать аналогичные соотношения) [4]:

$$\begin{aligned} \sigma_\tau(\mathbf{x}) &= 0, \\ \sigma_n(\mathbf{x}) &= \sigma_n(\bar{\mathbf{x}}) \leq 0, \\ u_n(\mathbf{x}) + u_n(\bar{\mathbf{x}}) &\leq \delta_{0n}(\mathbf{x}), \\ \sigma_n(\mathbf{x}) [u_n(\mathbf{x}) + u_n(\bar{\mathbf{x}}) - \delta_{0n}(\mathbf{x})] &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\bar{\mathbf{x}} \in \Gamma_{c,2}^k$ — сходственная (ближайшая) точка для $\mathbf{x} \in \Gamma_{c,1}^k$, $\delta_{0n}(\mathbf{x}) \geq 0$ — функция, задающая начальный зазор (участки поверхностей в начальный момент могут не соприкасаться друг с другом), $u_\tau = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}$, $u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, $\sigma_\tau = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\tau}$, $\sigma_n = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$, \mathbf{n} и $\boldsymbol{\tau}$ — вектор внешней нормали и касательный вектор в рассматриваемой точке.

Условия (5) гарантируют, что реализуется один из двух следующих вариантов (заранее неизвестно, какой именно):

1) Точка \mathbf{x} находится в контакте, и тогда верны соотношения $\sigma_n(\mathbf{x}) = \sigma_n(\bar{\mathbf{x}})$, $u_n(\mathbf{x}) + u_n(\bar{\mathbf{x}}) = \delta_{0n}(\mathbf{x})$, т. е. выполнено условие равенства нормальных компонент векторов координат и поверхностных сил для двух точек, причём контактные силы могут быть только сжимающими, если возникают растягивающие силы ($\sigma_n > 0$), то точка должна выйти из контакта по силовому критерию;

2) Точка \mathbf{x} не находится в контакте, и тогда верны соотношения $\sigma_n = 0$, $u_n(\mathbf{x}) + u_n(\bar{\mathbf{x}}) < \delta_{0n}(\mathbf{x})$, то есть между точками возникает зазор, при этом контактные силы равны нулю.

Таким образом, один из двух множителей в последнем условии (5) всегда равен нулю, что и обеспечивает выполнение данного условия.

В рассматриваемой системе тел учитываются $N - 2$ контактные пары таблетка/таблетка и $N - 1$ контактные пары таблетка/оболочка. Итоговая конфигурация контактных поверхностей заранее неизвестна, поэтому задача (2)–(5) является нелинейной.

При функционировании тепловыделяющего элемента наблюдается большое количество разнообразных физических явлений. Например, в общем случае приращение неупругих деформаций включает в себя приращения температурных ($d\varepsilon_{ij}^T$) и радиационных деформаций ($d\varepsilon_{ij}^v$), деформаций ползучести ($d\varepsilon_{ij}^c$) и растрескивания ($d\varepsilon_{ij}^{crk}$):

$$d\varepsilon_{ij}^0 = d\varepsilon_{ij}^T + d\varepsilon_{ij}^v + d\varepsilon_{ij}^p + d\varepsilon_{ij}^c + d\varepsilon_{ij}^{crk}.$$

Для описания реалистичных характеристик материалов (сплав циркония для оболочки и диоксид урана для топливных таблеток) использованы процедуры из библиотеки MATPRO [5].

Дискретизация задачи термомеханики выполнена с использованием метода конечных элементов [4]. Для решения контактной задачи применён модифицированный метод Неймана—Дирихле (один из вариантов метода декомпозиции области (МДО) без перехлёста подобластей) [6]. Для моделирования системы, включающей в себя большое количество тел, разработан численный алгоритм, основанный на применении двухуровневого аддитивного метода Шварца (вариант МДО с перекрытием подобластей) [6]. Данный алгоритм предполагает разбиение исходной области на ряд пересекающихся подобластей, при этом любая подобласть может включать в себя участки нескольких тел. В ходе итерационного процесса решение глобальной задачи сводится к решению локальных задач в каждой подобласти. Локальные задачи могут быть нелинейными (например, учитывать контакт или пластичность), они решаются независимо друг от друга. В конце итерации вычисляется новое приближение глобального решения. Для ускорения сходимости итерационного процесса использована дополнительная грубая сетка, на которой решалась вспомогательная задача, позволяющая на каждой итерации вычислить дополнительный вклад в вектор глобального решения. Более подробно данные алгоритмы описаны в [7]. С использованием разработанного модуля выполнена серия расчётов для моделирования выхода на номинальную мощность участка твэла, соответствующего $N - 1$ топливным таблеткам, в термоупругом приближении ($d\varepsilon_{ij}^0 = d\varepsilon_{ij}^T$). Считалось, что мощность тепловыделения в таблетке за 1 час менялась по линейному закону от 0 до номинального значения, температура оболочки являлась постоянной, между таблетками и оболочкой происходил теплообмен с постоянным коэффициентом теплоотдачи. Начальный зазор между таблетками и оболочкой равен 0. Нижние торцы оболочки и нижней таблетки закреплены по вертикали, к верхнему торцу верхней таблетки приложено постоянное давление 50 МПа, а на внешнюю поверхность оболочки действует постоянное давление 10 МПа.

В [7] представлены результаты расчётов для осесимметричной постановки. Количество таблеток $N - 1$ менялось от 1 до 100. Полученные результаты продемонстрировали, что построенный алгоритм (двухуровневый аддитивный метод Шварца) обеспечивает аккуратное выполнение граничных условий на контактных поверхностях. С увеличением количества таблеток время расчёта возрастало по зависимости, близкой к $O(N)$. В дальнейшем удалось получить аналогичные результаты для расчётов в трёхмерной постановке (для сектора 90°).

Представим результаты моделирования участка из 10 таблеток в следующей осесимметричной постановке. Температура в оболочке вычисляется после решения уравнения теплопроводности, на внешней поверхности оболочки поставлено условие 1 рода, между внутренней поверхностью оболочки и внешними поверхностями таблеток происходит теплообмен (значение коэффициента теплообмена зависит от разности температур и расстояния между соседственными точками). На тех участках тел, которые вступают в механический контакт (таблетка/таблетка и таблетка/оболочка), ставится условие идеального теплового контакта (для сходственных точек должны совпадать температуры и тепловые потоки). Для реализации условий теплового контакта использован метод Дирихле—Неймана (один из вариантов МДО).

Выход на номинальную мощность происходит за 10 шагов по времени, на каждом шаге в рамках итерационного цикла решается связанная термомеханическая задача.

Оболочка считается термоупругопластическим телом (использована модель пластического течения для материала с изотропным упрочнением, $d\varepsilon_{ij}^0 = d\varepsilon_{ij}^T + d\varepsilon_{ij}^p$), таблетка считается термоупругим телом с учётом растрескивания (хрупкого разрушения) материала ($d\varepsilon_{ij}^0 = d\varepsilon_{ij}^T + d\varepsilon_{ij}^{crk}$). Для описания растрескивания применена модель размазанных трещин [8], которая предполагает следующую связь векторов приращений упругой деформации и деформации растрескивания с вектором приращений напряжений:

$$\{\Delta\varepsilon^e\} + \{\Delta\varepsilon^{crk}\} = \begin{bmatrix} 1/E_r & -\nu/E & -\nu/E & 0 \\ -\nu/E & 1/E_z & -\nu/E & 0 \\ -\nu/E & -\nu/E & 1/E_\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/G \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\sigma_{rr} \\ \Delta\sigma_{zz} \\ \Delta\sigma_{\varphi\varphi} \\ \Delta\sigma_{rz} \end{Bmatrix}.$$

Здесь модифицированные модули Юнга E_i в зависимости от текущих значений напряжений σ_i ($i = r, \varphi, z$) меняются по линейному закону от номинального значения E (если $\sigma_i < -20$ МПа) до некоторого предельного значения E_∞ (если $\sigma_i > 20$ МПа). В расчётах использовано значение $E_\infty = E/100$ [8].

Анализ результатов проведённых расчётов показал, что использованный численный алгоритм позволяет добиться выполнения граничных условий (и тепловых и механических) на контактирующих поверхностях.

На рис. 1 показаны распределения радиальных, окружных и осевых напряжений на участке G , соответствующем 5-й и 6-й таблеткам, в расчёте с учётом растрескивания материала таблеток, а на рис. 2 — аналогичные величины в расчёте без учёта растрескивания. Координаты и перемещения нормированы на 1 мм, напряжения — на 1 МПа.

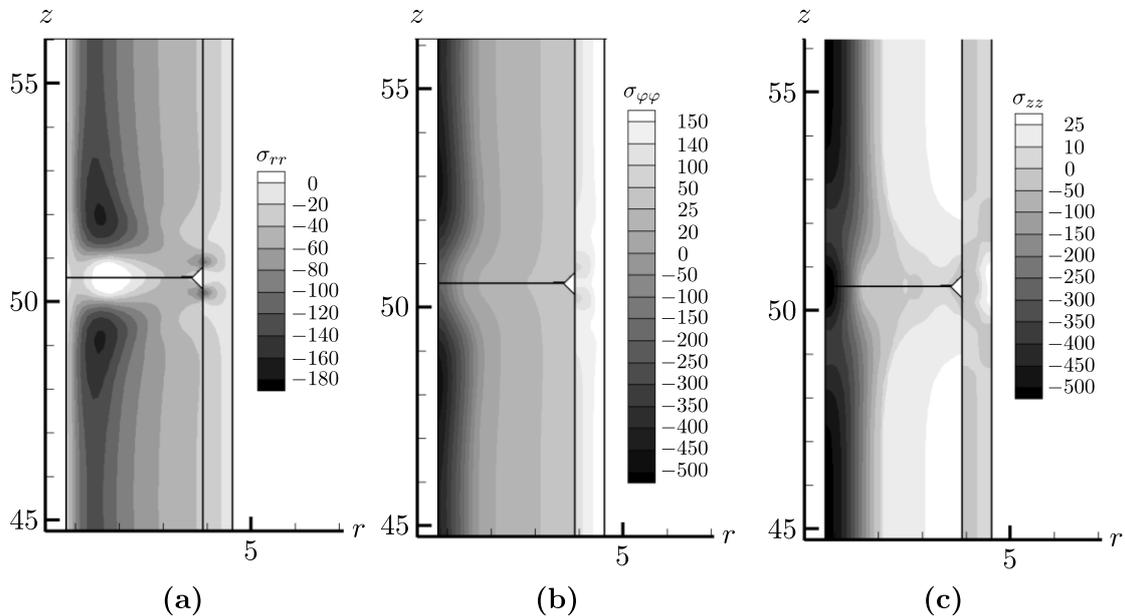


Рис. 1. Распределения напряжений в расчёте с растрескиванием таблеток: (а) — радиальных, (б) — окружных, (с) — осевых

Из распределения радиальных напряжений видно, что в местах контакта с оболочкой углов фасок таблеток ($z = 50.5$) возникают концентраторы напряжений: в этих зонах контактные давления (в зависимости от степени подробности сетки) могут в несколько раз превосходить значения давлений в центральных зонах.

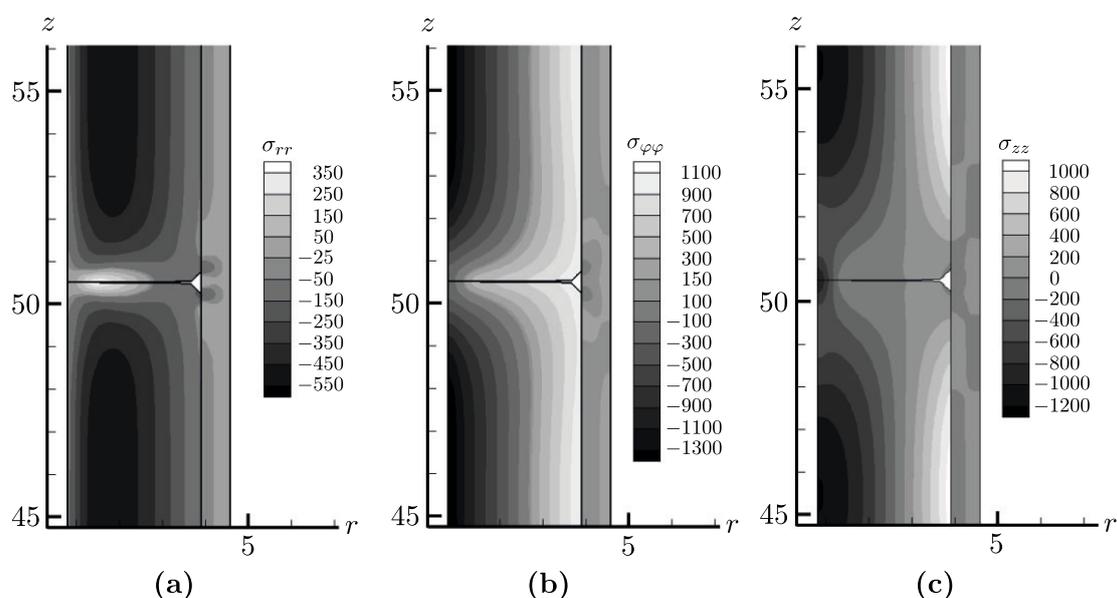


Рис. 2. Распределения напряжений в расчёте без растрескивания таблеток: (а) — радиальных, (б) — окружных, (с) — осевых

Сравнение рисунков показывает, что, если считать материал таблеток термоупругим, то в результате нагрева ближе к внешней поверхности таблеток возникают огромные растягивающие окружные и осевые напряжения (порядка 1 ГПа), что является физически недостоверным (реальный материал не выдерживает таких нагрузок). Используемая модель растрескивания позволяет снизить уровень растягивающих напряжений до 20–30 МПа, при этом в разы уменьшается и уровень сжимающих напряжений.

На рис. 3 показаны графики распределений интенсивности пластических деформаций ε_i^p вдоль внутренней поверхности оболочки в расчётах, в которых начальный зазор δ_{0n} между таблетками и оболочкой принимал значения 0 (верхний график), 0.01 (средний график) и 0.02 мм (нижний график). Увеличение зазора приводит к уменьшению величины контактного давления, которое действует со стороны таблеток на оболочку и, следовательно, к уменьшению величины пластических деформаций.

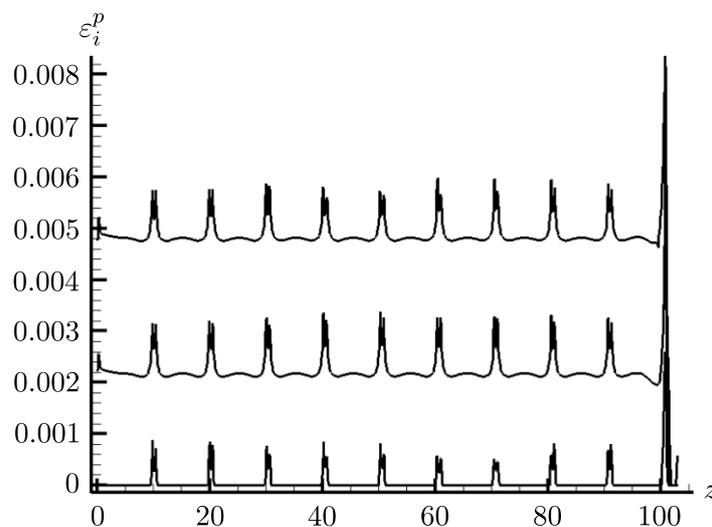


Рис. 3. Распределения интенсивности пластических деформаций в расчётах с различными величинами начальных зазоров

На рис. 3 видно, что для нулевого зазора среднее значение интенсивности пластических деформаций составляет 0.48%, в местах контакта углов фасок наблюдаются локальные максимумы деформации. Для величины зазора 0.01 среднее значение интенсивности пластических деформаций уменьшается до 0.22%, для величины зазора 0.02 пластические деформации образуются только на участках возле контакта углов фасок таблеток.

Показанные результаты расчётов демонстрируют возможность разработанного термомеханического модуля решать сложные мультиконтактные многомерные задачи с учётом различных неупругих деформаций, образующихся в моделируемых телах.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВЫХ БЛЕСКА ДВОЙНЫХ ЗВЁЗДНЫХ СИСТЕМ

Другая сфера применения платформы Теметос — моделирование течений газа в астрофизических объектах, в частности, в аккреционных дисках двойных звёздных систем [9]. В задачах астрофизики, которые предусматривают необходимость сопоставления подробной математической модели удалённого объекта с имеющими существенно ограниченное разрешение результатами наблюдений, важно не только провести расчёт параметров течений газа, но и вычислить интегральные характеристики, доступные к регистрации в эксперименте.

К таким характеристикам, например, относится интегральный по звёздной системе поток энергии излучения в зависимости от времени — кривая блеска. Кривые блеска ряда астрофизических объектов, таких как, например, РНЛ1445 [10] и V1239Her [11] имеют ряд особенностей, для объяснения которых необходимо исследовать внутреннюю структуру течения газа между компонентами двойной звёздной системы. В этом случае задача платформы Теметос состоит в объединении нескольких программных средств, позволяющих решать задачи как газовой динамики, так и теории переноса излучения, таким образом, чтобы в ходе исследования можно было и рассмотреть модель внутренних механизмов поведения звёздной системы, и показать зависимость наблюдательных проявлений от этих механизмов.

Примером спорного механизма является, например, характер взаимодействия струи плазмы, истекающей с поверхности звезды-донора через внутреннюю точку Лагранжа L_1 в полость Роша звезды-аккретора, с аккреционным диском — вращающимся облаком плазмы вокруг аккретора. Обычно рассматриваются два основных варианта. Первый — взаимодействие через образование небольшой области ударного торможения струи, так называемого „горячего пятна“ (см., например, [10, 12]). Второй — образование контактного разрыва и боковой ударной волны в протяжённой области слияния струи и диска, так называемой „горячей линии“ (см. [13], а также рис. 4).

Результаты трёхмерного газодинамического моделирования аккреционных дисков в работах [9, 14] не дают оснований для использования модели горячего пятна при построении синтетической кривой блеска. Расчёт гидродинамики взаимодействия струи, истекающей из точки L_1 , и аккреционного диска показывает, что вход струи в диск происходит безударным образом. В месте слияния диска и струи образуется „горячая линия“, связанная с формированием ударной волны на всём протяжении струи вследствие набегания на струю вещества диска. Обтекание сверхзвуковым потоком вещества диска плотной и холодной струи и приводит к возникновению боковой ударной волны — горячей линии.

С использованием платформы Теметос построена модель кривой блеска системы РНЛ1445 [10, 12].

Рассмотрим трёхмерную гидродинамическую модель аккреционного диска вместе со струей, истекающей из точки L_1 и являющейся для него источником вещества. Кроме того, элементами модели, дающими вклад в блеск системы, будем считать звезду-донор (коричневый карлик), а также аккретор (белый карлик). При этом, поскольку нас больше всего интересуют моменты времени (фазы вращения системы) в окрестности затмения, использование газодинамической модели в указанных в [9] предположениях (невязкий частично-ионизованный газ,

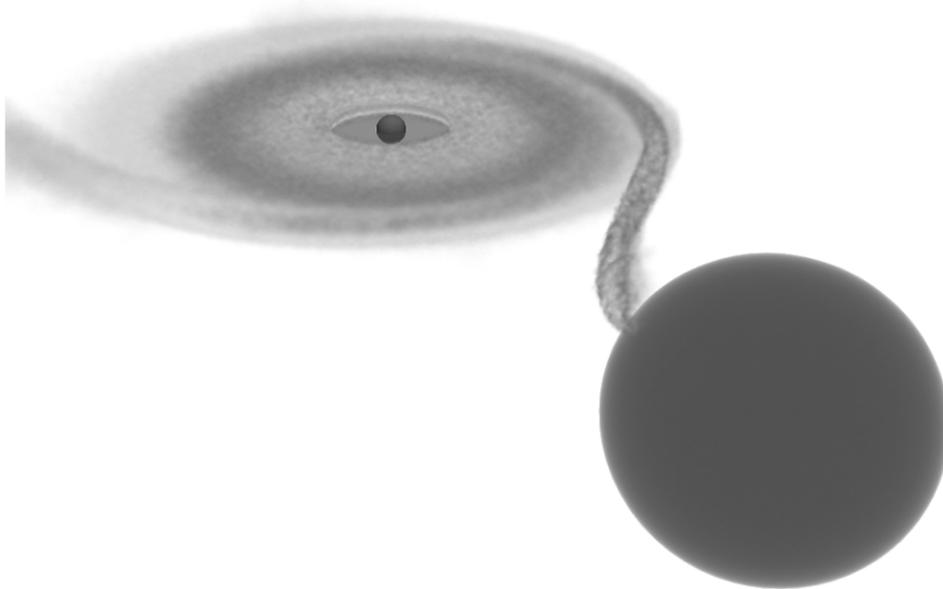


Рис. 4. Модель двойной звёздной системы с аккреционным диском

функция охлаждения чистого водорода) может оказаться недостаточным. Поэтому заменим внутреннюю часть расчётной области газодинамической модели (радиусом $\approx 4 R_{wd}$ с центром в аккреторе) на модельный тонкий диск с заданным потоком излучения с его поверхности.

Газодинамическая модель аккреционного диска строится на базе следующих предположений:

- течение частично-ионизованной водородной плазмы описывается системой уравнений динамики сжимаемого газа;
- самогравитация газа и воздействие магнитного поля не учитываются;
- плазма рассматривается как идеальный невязкий газ, нагревание которого происходит только за счёт преобразования гравитационной энергии аккрецирующего вещества во внутреннюю энергию газа;
- охлаждение газа происходит за счёт радиационных потерь в оптически тонкой среде.

2.1. Математическая модель

В соответствии со сделанными предположениями математическая модель включает в себя следующие уравнения:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{v} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \vec{v} + p \hat{I}) = -\rho \vec{\nabla} \Phi + 2\rho \vec{v} \times \vec{\Omega}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} (e + p)) = -\rho \vec{\nabla} \Phi \cdot \vec{v} - \Lambda(\rho, T), \quad (8)$$

где ρ — плотность, \vec{v} — скорость, p — давление, e — полная энергия единицы объёма газа, $\vec{\Omega}$ — вектор угловой скорости вращения системы, $\Lambda(\rho, T)$ — функция радиационного охлаждения газа из [9], T — температура, гравитационный потенциал Роша

$$\Phi = -\frac{GM_d}{\|\vec{r} - \vec{r}_d\|} - \frac{GM_a}{\|\vec{r} - \vec{r}_a\|} - \frac{1}{2} \|\vec{\Omega} \times (\vec{r} - \vec{r}_c)\|^2, \quad (9)$$

\vec{r} — радиус-вектор, M_d , M_a — массы компонент звёздной системы, \vec{r}_d , \vec{r}_a — их радиус-векторы, \vec{r}_c — радиус-вектор центра тяжести системы, G — гравитационная постоянная. Система уравнений газовой динамики замыкается уравнением состояния частично ионизованного газа в виде [15]

$$e = \frac{3}{2}p + \rho \frac{Ry}{m_p} i + \frac{\rho \|\vec{v}\|^2}{2}, \quad p = \rho kT \frac{1+i}{m_p}, \quad (10)$$

$$i = \left[1 + p \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e} \right)^{3/2} (kT)^{-5/2} e^{Ry/kT} \right]^{-1/2}, \quad (11)$$

где i — степень ионизации, ε — удельная внутренняя энергия газа, k — постоянная Больцмана, \hbar — приведённая постоянная Планка, Ry — энергия активации Ридберга, m_p и m_e — массы протона и электрона соответственно.

Для численного решения задачи моделирования течения плазмы в аккреционном диске использован трёхмерный решатель, описанный в [9, 14]. Он предполагает использование метода типа конечных объёмов для неструктурированных тетраэдральных сеток с интегрированием потоков на гранях ячеек с применением модифицированного HLLC решателя для газодинамической задачи Римана. Учёт радиационного охлаждения на каждом шаге интегрирования системы уравнений производится путём дополнительного дробления шага и решения уравнения для энергии с функцией охлаждения в правой части методом Дормана—Принса 5(4) [16]. Программный комплекс распараллелен с использованием разбиения расчётной области на под-области и технологии MPI. Расчёты выполнены на кластере К-60 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН с использованием вплоть до 500 вычислительных ядер.

2.2. Расчёт синтетической кривой блеска

Для вычисления потока энергии от системы и формирования кривой блеска применён следующий подход. Полный поток энергии F , получаемый от звёздной системы, может быть получен в результате вычисления интеграла вида

$$F = \int_S I(x, y) \frac{dS}{d^2},$$

где $I(x, y)$ — интенсивность излучения в плоскости, перпендикулярной оси зрения (картинной плоскости), x и y — координаты в этой плоскости, d — расстояние до источника.

Интенсивность $I(x, y)$ может быть получена из уравнения переноса излучения интегрированием вдоль луча, связывающего наблюдателя с моделируемой системой:

$$I(x, y) = \int_0^{+\infty} \frac{\bar{\Lambda}(x, y, z)}{4\pi} e^{-\tau(x, y, z)} dz,$$

$$\tau(x, y, z) = \int_0^z \alpha_{\text{PI}}(\rho(x, y, z'), T(x, y, z')) ds',$$

где z — координата вдоль луча зрения, $\bar{\Lambda}$ — функция охлаждения Λ , усреднённая по газодинамическому временному шагу, τ — оптическая толщина среды между наблюдателем и текущей точкой, α_{PI} — усреднённый по Планку коэффициент поглощения.

Коэффициент поглощения α_{PI} принят равным бесконечности на поверхностях звезды-донора и аккретора, а также на поверхности тонкого диска вокруг аккретора. Во всех остальных точках, как и в [9], эта величина получается усреднением по Планку с использованием данных из газодинамического расчёта об излучённом потоке энергии:

$$\alpha_{\text{PI}}(\rho, T) = \frac{\Lambda(\rho, T)}{4\sigma_{\text{SB}}T^4},$$

где σ_{SB} — постоянная Стефана—Больцмана.

При прохождении луча через поверхность донора, аккректора или тонкого диска в окрестности аккректора, интегрирование уравнения переноса прекращалось и для соответствующей точки картинной плоскости задавалась интенсивность, соответствующая объекту на луче зрения. При этом поверхность донора не совпадает с поверхностью его полости Роша. Радиус донора взят равным 0.9 от размера полости Роша в направлении оси вращения системы.

2.3. Результаты моделирования

Проведено 3D газодинамическое моделирование истечения газа из окрестности точки L_1 в полость Роша аккректора, соответствующего системе PHL1445. При обезразмеривании модели (6)–(11) в качестве масштабов основных величин выбраны расстояние между компонентами $a = 0.55R_{\odot}$, где R_{\odot} — радиус Солнца, период обращения системы $T_{orb} = 76.3$ мин., плотность газа $\rho_0 = 10^{-10}$ г/см³. Массы компонент: масса донора $M_d = 0.064M_{\odot}$ и масса аккректора $M_a = 0.73M_{\odot}$, где M_{\odot} — масса Солнца.

Аккреционный диск формируется примерно за 5 орбитальных периодов. Трёхмерное изображение аккреционного диска вместе с донором, аккректором и тонким диском в случае положения диска в экваториальной плоскости в момент времени $t = 5$ приведено на рис. 4.

Средняя толщина диска равна 0.06, отношение толщины диска к диаметру — 1/10. Характерными чертами течения являются отошедшая ударная волна и уплотнение струи при входе в диск. Газ в диске является холодным (его температура слабо меняется внутри диска и не превосходит $5 \cdot 10^3$ К) и достаточно слабо ионизованным (коэффициент ионизации в диске не превышает 0.2).

Видно, что вход струи в диск является безударным, струя существенно отклоняется как действием сил инерции, так и давлением вещества диска на боковую поверхность. Область взаимодействия струи и диска тонкая и протяжённая, что не позволяет говорить о наличии горячего пятна. При этом распределение плотности показывает, что существенная часть вещества диска срывается с его поверхности, совершая полный оборот после попадания в диск из струи. В районе отошедшей ударной волны толщина диска увеличивается, что создаёт своего рода газовую оболочку вокруг этой части диска и струи, исходящей из точки L_1 .

За счёт столкновения с обтекающей „оболочкой“ на наветренной стороне струи образуется сильно излучающая кромка. Выделяемая на этой кромке энергия сравнима с энерговыделением в центральных областях диска. Это означает, что кромка должна быть хорошо различима на наблюдательных кривых блеска, особенно после затмения. Действительно, как правило, на кривых блеска сразу после затмения имеется своеобразная „полка“, что связано с выходом указанной кромки из затмения (см. рис. 5). Положение этой „полки“ позволяет определять положение струи относительно аккректора, а следовательно — скорость струи в точке L_1 . Чем ближе полка к фазе затмения, тем выше скорость струи.

Плотность вещества струи в точке L_1 выбрана так, чтобы темп перетока массы между компонентами составлял $\dot{M}_s \approx \eta \cdot 10^{-11} M_{\odot} \text{ год}^{-1}$, где $\eta = 0.68; 0.91; 1.13; 1.36$ для скоростей $v = 150; 200; 250; 300$ км/с соответственно. Выбранные сравнительно высокие скорости течения газа в точке L_1 сравнимы с орбитальной скоростью системы $\sqrt{G \frac{M_a + M_d}{a}} \approx 532.8$ км/с. Отметим, что в работе [17], где моделировалось свободное истечение плазмы с поверхности донора, соотношение между орбитальной скоростью и скоростью плазмы в точке L_1 оказалось аналогичным.

Полученные синтетические кривые блеска показывают хорошее соответствие между результатами моделирования и усреднёнными данными наблюдений. Синтетическая кривая блеска, как и наблюдательные кривые, является асимметричной. Анализ вклада компонент (аккреционный диск, аккректор, донор, тонкий диск) в итоговую кривую блеска показывает, что такой характер кривой обеспечивается асимметрией блеска аккреционного диска, который после затмения оказывается несколько прикрыт срывающейся с его поверхности оболочкой.

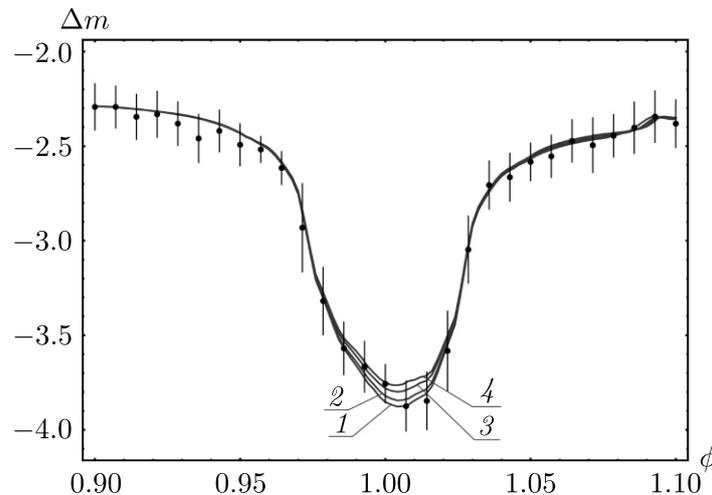


Рис. 5. Кривые блеска (зависимость светимости Δm от фазы ϕ) для различных скоростей струи в точке L_1 : 1 — 300 км/с, 2 — 250 км/с, 3 — 200 км/с, 4 — 150 км/с. Наблюдательные данные отмечены чёрными точками с указанием средней погрешности

Как уже было отмечено, наличие оболочки обусловлено характером обтекания струи веществом диска. Также, по-видимому, на формирование срыва газа с поверхности диска влияет относительно высокая скорость струи в точке L_1 — при уменьшении скорости втекания кривая становится более симметричной.

Видно формирование „полки“ после затмения, тем более резкой, чем выше скорость газа в точке L_1 . В то же время соответствие между наблюдательными и синтетическими кривыми блеска достигается за счёт высокой скорости потока в точке L_1 . Положение полки и минимума на рис. 5 могут быть сдвинуты вправо по оси фаз (как это имеет место в наблюдениях) либо за счёт высокой скорости струи в точке L_1 , либо в случае приближения области взаимодействия струи и диска к аккректору. При положении диска в экваториальной плоскости системы в случае отсутствия вязкости работает только первый механизм.

2.4. Случай наклонного диска

Расчёты показали, что несмотря на положение струи, истекающей от донора, в экваториальной плоскости системы, в системе возможно формирование наклонного по отношению к этой плоскости аккреционного диска. Наклон диска развивается по следующему сценарию.

В начальный момент времени расчётная область заполнена газом низкой плотности, что с одной стороны необходимо для обеспечения корректности моделирования в рамках модели газовой динамики, а с другой выглядит естественным в силу существования слабого ветра от донора, распространяющегося во всех направлениях, а не только через внутреннюю точку Лагранжа. Сразу после запуска расчёта этот газ формирует тонкую дисковую структуру, в которую входит струя, истекающая из точки L_1 . Струя увеличивает массу этого диска, так что диск быстро отклоняет струю от её первоначального положения. Сдвиг струи в радиальном направлении составляет $0.1a$ в течение первого орбитального периода и $0.05a$ — в течение второго.

В процессе этого движения около верхней и нижней поверхностей диска вблизи входа в него струи формируются обратные вихри, неустойчивость и асимметричность которых приводит к наклону внутренней (лёгкой) части диска. Также к увеличению наклона в случае его возникновения приводит неоднородность распределения массы в диске и гравитационного поля аккректора, возмущённого донором (приливные силы). Угол наклона достигает 7° .

Сформировавшийся диск в течение одного орбитального периода практически не меняет своего наклона относительно наблюдателя и проходит все фазы вращения относительно

системы отсчёта, связанной с двойной звездой. Наклонный диск ретроградно прецессирует с периодом около 40–50 орбитальных периодов системы (см. рис. 6).

Наклон диска влияет на вид синтетических кривых блеска, получаемых путём интегрирования энерговыделения диска, аккректора и донора в направлении наблюдателя. Кривые блеска, соответствующие разным фазам прецессии, объясняют различие в характере затмения в разные дни наблюдений.

В большинстве наблюдений кривые блеска демонстрируют асимметричность в момент затмения, зачастую сопряжённую с формированием нисходящей ступеньки. Такие кривые соответствуют наклону диска в сторону донорской звезды, когда струя входит в верхнюю поверхность диска. Можно говорить о формировании горячего пятна на поверхности диска в некоторых фазах прецессии. Характерный вид кривых блеска в сопоставлении с наблюдениями и вид соответствующей фазы наклона диска в этом случае изображены в верхнем ряду на рис. 6.

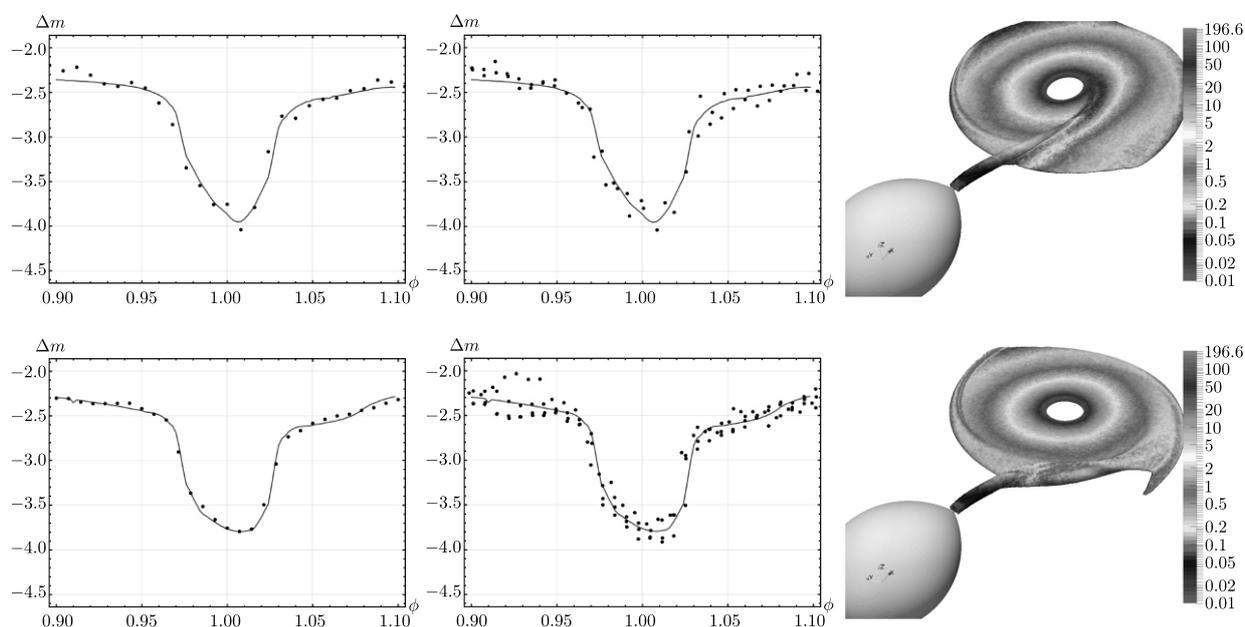


Рис. 6. Кривые блеска вместе с усреднёнными (левая панель) и полными (средняя панель) наблюдательными данными, а также поверхность уровня плотности в соответствующей фазе наклона диска с распределением усреднённой Λ (правая панель). Верхний ряд — случай формирования на поверхности диска горячего пятна, нижний — формирования на кромке диска горячей линии. Наблюдательные данные [18] даны точками

Более симметричные кривые без формирования ярко выраженной ступеньки соответствуют прохождению диска через нейтральное положение в экваториальной плоскости. Этот вариант больше соответствует представлениям о формировании на кромке диска горячей линии [13]. Характерный вид кривых блеска в сопоставлении с наблюдениями и соответствующая фаза наклона диска в этом случае изображены в нижнем ряду на рис. 6.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена платформа Теметос и её возможности по решению задач механики сплошной среды. В частности, рассмотрен термомеханический модуль, позволяющий решать контактные задачи, возникающие при моделировании тепловыделяющих элементов атомных реакторов. Показано, что использование моделей с учётом растрескивания позволяет существенно снизить эффективные напряжения в топливной таблетке.

Также представлены результаты моделирования кривых блеска двойной звёздной системы с использованием совместно газодинамического модуля и модуля, реализующего трассировку лучей через триангулированную пространственную область. В ходе расчётов получен как стандартный режим формирования аккреционного диска в экваториальной плоскости звёздной системы, так и режим с образованием наклонного диска. Последний позволяет интерпретировать индивидуальные кривые блеска.

Результаты расчётов моделей хорошо соответствуют наблюдениям, а платформа Теметос позволяет как анализировать скрытые механизмы, объясняющие поведение технических систем и физических явлений, так и проводить прямое сопоставление результатов моделирования с наблюдательными данными. При этом важными являются и средства платформы для подготовки и проведения расчётов, и её возможности, связанные с постобработкой результатов моделирования и их визуализации (в широком смысле).

ЛИТЕРАТУРА

1. Галанин М. П., Горбунов-Посадов М. М., Ермаков А. В., Лукин В. В., Родин А. С., Шаповалов К. Л. Прототип интегрированной программной платформы для сопровождения вычислительного эксперимента в комплексных задачах математического моделирования // Труды ИСП РАН. 2014. Т. 26, № 3. С. 51–68; DOI: 10.15514/ISPRAS-2014-26(3)-2
2. Галанин М. П., Лукин В. В., Родин А. С., Сорокин Д. Л. Применение программной платформы Теметос для разработки среды моделирования электромагнитного ускорителя // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2018. Статья 44; DOI: 10.20948/prepr-2018-44
3. Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: МГТУ, 2008.
4. Wriggers P. Computational Contact Mechanics. Heidelberg: Springer, 2006; DOI: 10.1007/978-3-540-32609-0
5. Hagrman D. L., Reyman G. A. A handbook of materials properties for use in the analysis of lightwater reactor fuel rod behavior. Idaho: INEL, 1979.
6. Toselli A., Widlund O. Domain Decomposition methods — Algorithms and Theory. Heidelberg: Springer, 2005; DOI 10.1007/b137868
7. Галанин М. П., Родин А. С. Исследование и применение метода декомпозиции области для моделирования тепловыделяющего элемента // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2022. Т. 62. № 4. С. 659–676; DOI: 10.31857/S004446692204007X
8. Suzuki M., Saitou H. Light water reactor fuel analysis code FEMAXI-6 (Ver.1); Detailed structure and user's manual. Tokai: JAEA, 2006; DOI: 10.11484/JAEA-Data-Code-2005-003
9. Lukin V. V., Malanchev K. L., Shakura N. I., Postnov K. A., Chechetkin V. M., Utrobin V. P. 3D-modeling of accretion disc in eclipsing binary system V1239 Her // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2017. V. 467, N 3. P. 2934–2942.; DOI: 10.1093/mnras/stx309
10. Savoury C. D. J., Littlefair S. P., Dhillon V. S., Marsh T. R., Gaensicke B. T., Copperwheat C. M., Kerry P., Hickman R. D. G., Parsons S. G. Cataclysmic variables below the period gap: mass determinations of 14 eclipsing systems // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2011. V. 415, N 3. P. 2025–2041; DOI: 10.1111/j.1365-2966.2011.18707.x
11. Khruzina T. S., Golysheva P. Y., Katysheva N. A., Shugarov S. Y., Shakura N. I. The Dwarf Nova V1239 Herculis In Quiescence // Astron. Rep. 2015. V. 59, N 4. P. 288–312; DOI: 10.1134/S1063772915040034
12. McAllister M. J., Littlefair S. P., Baraffe I., Dhillon V. S., Marsh T. R., Bento J., Bochinski J., Bours M. C. P., Breedt E., Copperwheat C. M., Hardy L. K., Kerry P., Parsons S. G., Rostron J. W., Sahman D. I., Savoury C. D. J., Tunncliffe R. L. PHL 1445: an eclipsing cataclysmic variable with a substellar donor near the period minimum // Mon. Not. R. Astron. Soc. 2015. V. 451, N 1. P. 114–125; DOI: 10.1093/mnras/stv956
13. Bisikalo D. V., Boyarchuk A. A., Chechetkin V. M., Kuznetsov O. A., Molteni D. Three-dimensional numerical simulation of gaseous flow structure in semidetached binaries // Mon. Not. R. Astron. Soc. 1998. V. 300, N 1. P. 39–48; DOI: 10.1046/j.1365-8711.1998.01815.x

14. *Galanin M. P., Lukin V. V., Chechetkin V. M.* 3D hydrodynamical simulation of accretion disk in binary star system using RKDG CFD solver // *J. Phys. Conf. Ser.* 2018. V. 1103. Article 012019; DOI: 10.1088/1742-6596/1103/1/012019
15. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Статистическая физика. Часть I. М.: Наука, 1976.
16. *Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
17. *Nagae T., Oka K., Matsuda T., Fujiwara H., Hachisu I., Boffin H. M. J.* Wind accretion in binary stars I. Mass accretion ratio // *Astron. Astrophys.* 2004. V. 419. P. 335–343; DOI: 10.1051/0004-6361:20040070
18. *Гольшева П. Ю.* Фотометрические исследования катаклизмических переменных звезд: дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.03.02. М.: МГУ, 2020.

UDC 519.63

**TEMETOS SOFTWARE PLATFORM AND ITS APPLICATIONS IN
PROBLEMS OF CONTINUUM MECHANICS**© 2023 M. P. Galanin^a, V. V. Lukin^b, A. S. Rodin^c*Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences,
Moscow, 125047 Russia*E-mails: ^agalan@keldysh.ru, ^bvvlukin@gmail.com, ^crals@bk.ru

Received 08.08.2023, revised 27.10.2023, accepted 15.11.2023

Abstract. The Temetos platform is designed to conduct computational experiments at all stages of analysis and study of continuum mechanics models. A module has been developed to study the stress-strain state of a system of bodies with allowance for inelastic strains and contact interaction. It was used to analyze a fuel element that included up to 100 fuel pellets and a shell. The platform's solvers are applied to astrophysics problems. Models of the formation of accretion disks in binary star systems that allow the interpretation of observation results are constructed.

Keywords: mathematical modelling, Temetos software platform, continuum mechanics, computational experiment.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2023.26.402

REFERENCES

1. M. P. Galanin, M. M. Gorbunov-Posadov, A. V. Ermakov, V. V. Lukin, A. S. Rodin, and K. L. Shapovalov, "A prototype of an integrated software platform to support computational experiments in complex mathematical modeling problems," *Tr. Inst. Sist. Progr. Ross. Akad. Nauk* **26** (3), 51–68 (2014). [https://doi.org/10.15514/ISPRAS-2014-26\(3\)-2](https://doi.org/10.15514/ISPRAS-2014-26(3)-2)
2. M. P. Galanin, V. V. Lukin, A. S. Rodin, and D. L. Sorokin, "Application of the Temetos software platform for the development of an electromagnetic accelerator simulation environment," Preprint no. 44 (Moscow: Keldysh Inst. Appl. Math. Russ. Acad. Sci., 2018). <https://doi.org/10.20948/prepr-2018-44>
3. V. S. Zarubin and G. N. Kuvyrkin, *Mathematical Models of Continuum Mechanics and Electrodynamics* (MGTU, Moscow, 2008) [in Russian].
4. P. Wriggers, *Computational Contact Mechanics* (Springer, Heidelberg, 2006). <https://doi.org/10.1007/978-3-540-32609-0>
5. D. L. Hagrman and G. A. Reymann, *A Handbook of Materials Properties for Use in the Analysis of Lightwater Reactor Fuel Rod Behavior* (INEL, Idaho, 1979).
6. A. Toselli and O. Widlund, *Domain Decomposition methods – Algorithms and Theory* (Springer, Heidelberg, 2005). <https://doi.org/10.1007/b137868>
7. M. P. Galanin and A. S. Rodin, "Investigation and application of the domain decomposition method for simulating fuel elements," *Comput. Math. Math. Phys.* **62** (4), 641–657 (2022). <https://doi.org/10.1134/S0965542522040078>
8. M. Suzuki and H. Saitou, "Light water reactor fuel analysis code FEMAXI-6 (Ver.1); Detailed structure and user's manual," (JAEA, Tokai, 2006). <https://doi.org/10.11484/JAEA-Data-Code-2005-003>
9. V. V. Lukin, K. L. Malanchev, N. I. Shakura, K. A. Postnov, V. M. Chechetkin, and V. P. Utrobin, "3D-modeling of accretion disc in eclipsing binary system V1239 Her," *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **467** (3), 2934–2942 (2017). <https://doi.org/10.1093/mnras/stx309>

10. C. D. J. Savoury, S. P. Littlefair, V. S. Dhillon, T. R. Marsh, B. T. Gaensicke, C. M. Copperwheat, P. Kerry, R. D. G. Hickman, and S. G. Parsons, “Cataclysmic variables below the period gap: Mass determinations of 14 eclipsing systems,” *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **415** (3), 2025–2041 (2011). <https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2011.18707.x>
11. T. S. Khruzina, P. Y. Golysheva, N. A. Katysheva, S. Y. Shugarov, and N. I. Shakura, “The dwarf nova V1239 herculis in quiescence,” *Astron. Rep.* **59** (4), 288–312 (2015). <https://doi.org/10.1134/S1063772915040034>
12. M. J. McAllister, S. P. Littlefair, I. Baraffe, V. S. Dhillon, T. R. Marsh, J. Bento, J. Bochinski, M. C. P. Bours, E. Breedt, C. M. Copperwheat, L. K. Hardy, P. Kerry, S. G. Parsons, J. W. Rostron, D. I. Sahman, C. D. J. Savoury, and R. L. Tunnicliffe, “PHL 1445: An eclipsing cataclysmic variable with a substellar donor near the period minimum,” *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **451** (1), 114–125 (2015). <https://doi.org/10.1093/mnras/stv956>
13. D. V. Bisikalo, A. A. Boyarchuk, V. M. Chechetkin, O. A. Kuznetsov, and D. Molteni, “Three-dimensional numerical simulation of gaseous flow structure in semidetached binaries,” *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **300** (1), 39–48 (1998). <https://doi.org/10.1046/j.1365-8711.1998.01815.x>
14. M. P. Galanin, V. V. Lukin, and V. M. Chechetkin, “3D hydrodynamical simulation of accretion disk in binary star system using RKDG CFD solver,” *J. Phys. Conf. Ser.* **1103**, 012019 (2018). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1103/1/012019>
15. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theoretical Physics. Statistical Physics. Part I* (Nauka, Moscow, 1976) [in Russian].
16. E. Hairer, S. P. Norsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations. Part I. Nonstiff Problems* (Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg–New York–London–Paris–Tokyo, 1987; Mir, Moscow, 1990).
17. T. Nagae, K. Oka, T. Matsuda, H. Fujiwara, I. Hachisu, and H. M. J. Boffin, “Wind accretion in binary stars I. Mass accretion ratio,” *Astron. Astrophys.* **419**, 335–343 (2004). <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20040070>
18. P. Yu. Golysheva, “Photometric studies of cataclysmic variables,” *Cand. Sci. (Phys.-Math.) Dissertation*, (Moscow State Univ. Moscow, 2020) [in Russian].