

С приходом в ИТПМ Николая Николаевича Яненко (1976 г.) одним из приоритетных направлений научной деятельности сотрудников стало математическое моделирование. Этому способствовало три причины:

1. все более сложных теоретических моделей;
2. научные диапазоны нового директора и его настойчивость;
3. переход в институт из ВЦ отдела механики сплошных сред, специализирующегося на широком использовании математического моделирования как эффективного средства решения актуальных задач физики и механики.

Этот отдел, разделенный на несколько лабораторий, сразу включился в научные разработки института, что способствовало повышению уровня исследований в ряде направлений и "старых", и "новых" сотрудников. Отметим, что и после смерти Н.Н. Яненко и перехода названного отдела почти в полном составе в Институт вычислительных технологий СО РАН работы по математическому моделированию в ИТПМ интенсивно продолжаются.

В ИТПМ была окончательно сформулирована и наполнена конкретным содержанием идея, выдвинутая Н.Н. Яненко и рядом других занимающихся прикладными задачами ученых, о "производственном" характере математического моделирования сложных научно-технических проблем. Речь идет о "технологической цепочке": объект исследования, физическая модель, математическая модель, численный алгоритм, программа, расчет, уточнение модели и т. д. В идеале эта цепочка после определенного числа итераций должна заканчиваться созданием пакета прикладных программ, ориентированных на решение достаточно широкого класса задач. Основы создания таких пакетов в ИТПМ были заложены под руководством и при непосредственном участии Н.Н. Яненко. Методологический подход здесь был следующим.

Построение пакета прикладных программ начинается с выбора модели и вычислительного алгоритма, по возможности в наиболее общем виде (о чем конкретно сказано ниже); затем проводится его модульный анализ, под которым понимается разбиение исходной задачи на ряд более простых задач (модулей), определяющихся как краевые с однородной физико-математической моделью, однородной разностной сеткой и целиком входящих в оперативную память компьютера. В рамках каждого модуля начинается построение хорошо обусловленной сетки. Сведение конкретной общей задачи к последовательности более простых называется модульной декомпозицией.

Прояснению многих вопросов, связанных с пакетами прикладных программ и вообще с технологической цепочкой, в том числе и самого понятия модуля, способствовал всесоюзный семинар по комплексам больших программ математической физики, который в течение длительного времени проходил регулярно раз в два года и собирал много участников из научных центров СССР. Четко сформулировать некоторые интуитивно ясные понятия оказалось не так просто, как предполагалось априори. Часто дискуссии принимали весьма схоластический характер, но иногда приводили к явному прогрессу, хотя нередко и спокойно затухали.

На основе модульной декомпозиции в институте был создан ряд пакетов, о которых будет сказано ниже. После выбора объекта исследования прежде всего с

точки зрения научного сотрудника, занимающегося математическим моделированием, возникает вопрос о соответствующей математической модели. Для процессов, которые традиционно изучаются в ИТПМ и могут быть рассмотрены в рамках идеальной газодинамики и аэродинамики, современные математические модели, включающие в себя классические уравнения Эйлера и Навье - Стокса с постоянным коэффициентом вязкости, являются вполне достаточными для подробного описания объекта исследования. Однако в большинстве случаев реальных ситуаций необходима работа по уточнению известных и развитию новых моделей. Это относится ко многим разделам механики, из которых можно выделить динамику турбулентных и гетерогенных сред, плазмы и твердых тел, испытывающих большие деформации.

Проблема турбулентности, несмотря на весьма интенсивные ее исследования, остается всегда актуальной, поэтому вполне естественно, что в институте соответствующие работы, в том числе и связанные с математическим моделированием, проводились всегда. Наряду с адаптацией известных моделей к расчетам конкретных течений, прослеживается тенденция и к поиску новых возможностей описания неравновесной турбулентности. К таким исследованиям относятся:

1. построение контргradientных моделей на основе понятия отрицательной или, точнее, знакопеременной турбулентной вязкости с привлечением моментов третьего порядка (Н.Н. Яненко, А.Ф. Курбацкий);
2. использование топологических свойств среды и величины, известной под названием спиральности (Ю.А. Березин, В.П. Жуков);
3. уточнение понятия континуума с введением внутренних моментов импульсов среды (Ю.А. Березин, В.М. Трофимов).

Работы с применением этих подходов способствовали более углубленному анализу ситуаций, в которых, возможно, имеет место обратный каскад энергии (переход энергии мелкомасштабных пульсаций в крупномасштабные вихри), и позволили качественно объяснить его механизм. Достаточно хорошо это было продемонстрировано в цикле работ Березина, Жукова, Трофимова, посвященных изучению обратного каскада энергии в задачах неравновесной тепловой конвекции в средах с вращением и вихреобразованием в стратифицированной атмосфере.

Для изучения процессов в гетерогенных средах, в частности, для создания теоретической основы холодного напыления порошкообразных покрытий, были построены эффективные модели, пригодные как для реагирующих, так и для нереагирующих сред (В.М. Фомин, А.В. Федоров с сотрудниками) и обобщенные позже на случай гетерогенных реакций (воспламенение, горение) и фазовых переходов (плавление, кристаллизация). Наряду с моделями, основанными на феноменологических уравнениях механики многофазных сред, найдены возможности, позволяющие описывать течение с резкими изменениями концентрации частиц. Очень интересные модели пористых сред, находящихся под воздействием сильных ударных волн, развиты в работах С. П. Киселева.

Переходя к описанию математических моделей плазмы, отмечу, что такие модели подразделяются на три группы: кинетические, гидродинамические и

гибридные.

Наиболее детальное описание - это кинетические уравнения для функций распределения заряженных частиц и уравнения Максвелла с самосогласованным электромагнитным полем. Такие кинетические модели трудны для реализации ввиду слишком большой разницы в массах ионов и электронов, а также в соответствующих пространственных и временных масштабах.

Модели более простые, гидродинамические, формулируются с помощью моментов функций распределения.

Гибридные модели строятся на основе кинетического уравнения для ионов и гидродинамических уравнений для электронной компоненты плазмы. В институте существенное развитие получили и гидродинамические, и гибридные модели (Ю.А. Березин, В.А. Вшивков, М.П. Федорук). Самосогласованное включение аномальных коэффициентов переноса, связанных с возникновением в плазме мелкомасштабных неустойчивостей, позволило создать адекватные модели для детального исследования волн конечной амплитуды и ударных волн в разреженной плазме.

Глубокое развитие в ИТПМ получили модели деформируемых твердых тел, которые участвуют в процессах высокоскоростного соударения, испытывая при этом очень большие деформации вплоть до разрушения (В.М. Фомин, Г.А. Сапожников, И.И. Шабалин). Упомяну также о математических моделях для ряда других направлений: баллистический и квазибаллистический режимы для электронно-дырочной плазмы (Ю.А. Березин, М.П. Федорук), уравнения состояния для ряда смесей, в частности графит - медь - воздух - алмаз, образование критических зародышей в пересыщенном паре (Г.В. Гадияк).

Численная реализация математических моделей, комплексность которых является отражением сложности изучаемых явлений, требует надежных алгоритмов, обеспечивающих разумную точность. В институте широкое развитие получили различные модификации метода, известного под общим названием "метод частиц в ячейках". В этом случае среда представляется набором большого числа модельных частиц, которые перемешаются в пространстве согласно задаваемым выбранной моделью уравнениям движения, а макроскопические характеристики вычисляются с помощью некоторых, иногда весьма тонких, процедур осреднения.

Разработка алгоритмов неразрывно связана с методами построения разностных сеток, что особенно важно при решении задач с большими деформациями области течения и значительными изменениями пространственного распределения параметров среды. Для задач высокоскоростного соударения тел в ИТПМ создан эффективный алгоритм, включающий локальную перестройку разностной сетки, учет трения на контактных границах, образование свободных поверхностей, выделение трещин в расчетной области, не совпадающих с границами ячеек (В.М. Фомин, Г.А. Сапожников, А.И. Гулидов). Для задач газодинамики были развиты методы построения адаптивных сеток, зависящих как от геометрии области, так и от потока, основанные на вариационном принципе и геометрических соображениях (Н.Н. Яненко, В.Д. Лисейкин, В.П. Шапеев).

Во многих явлениях, которые могут изучаться с помощью моделей механики

сплошных сред, процессы происходят таким образом, что в течениях возникают особенности, например ударные волны, контактные линии и полосы, схлопывания, в связи с чем при сквозном расчете необходимо эти особенности локализовать. Для этой цели были разработаны дифференциальные анализаторы особенностей (Н.Н. Яненко, В.М. Фомин, Е.В. Ворожцов) с привлечением не только техники определения экстремумов по результатам сквозных расчетов, но и теории распознавания образов. Наряду с развитием метода частиц велась интенсивная работа по конструированию эффективных конечно-разностных схем, обладающих хорошими свойствами аппроксимации и устойчивости для уравнений Эйлера и Навье-Стокса (Ю.И. Шокин, Л.Б. Чубаров, В.М. Ковеня, Г.А. Тарнавский). В связи с этим нельзя не отметить работы по символьным преобразователям на ЭВМ для конструирования и исследования устойчивости разностных схем (Е.В. Ворожцов), которые позволили автоматизировать очень громоздкие выкладки.

Проектирование, создание и эксплуатация космических аппаратов требуют численного моделирования гиперзвуковых течений в широком диапазоне режимов - от континуального до свободно-молекулярного, причем для конечных чисел Кнудсена единственной возможностью является метод прямого статистического моделирования. М.С. Ивановым с сотрудниками были созданы очень эффективные модификации указанного метода (схемы мажорантной частоты, межмолекулярных столкновений, обмена энергией между поступательными и внутренними степенями свободы молекул, взаимодействия с твердыми стенками, оригинальные вычислительные сетки), позволившие существенно расширить класс решаемых задач. На базе этих разработок создан вычислительный "комбайн", адаптированный к суперкомпьютерам с параллельными процессорами.

В институте было выполнено много работ, опубликованных в ряде солидных отечественных и зарубежных журналов, а также в виде монографий, содержащих результаты математического моделирования сложных и актуальных научно-технических задач.

Отметим здесь следующие направления:

- высокоскоростное соударение деформируемых тел (В.М. Фомин с сотрудниками),
- холодное газодинамическое напыление покрытий и детонационные, ударные волны в смесях (В.М. Фомин, А.В. Федоров),
- прямое статистическое моделирование многомерных течений разреженного газа с химическими реакциями (М.С. Иванов с сотрудниками),
- ударные волны и процессы взаимодействия плазменных сгустков с замагниченным плазменным фоном (Ю.А. Березин, В.А. Вшивков, М.П. Федорук),
- вычислительная томография (Н.Г. Преображенский, В.В. Пикалов, А.Е. Булышев),
- анализ развития возмущений при ламинарно-турбулентном переходе (С.А. Гапонов, В.Я. Левченко с сотрудниками),
- плазменный рельсотрон (С.С. Каинельсон),

- проблема цунами (Ю.И. Шокин с сотрудниками),
- аэродинамика (В.М. Ковеня с сотрудниками),
- задачи упругости (А.Н. Коновалов с сотрудниками),
- электрофизические процессы в твердотельной плазме (Ю.А. Березин, Г.В. Гадияк с сотрудниками).

В соответствии с технологической цепочкой и идеями модульной декомпозиции некоторые исследования, связанные с использованием методов математического моделирования, привели к созданию пакетов прикладных программ, например "Арфа", "Зеркало", KRUG-24, KRUG-34.

Общее назначение пакета "Арфа" - расчет полета ракеты от старта до выхода на орбиту. В него входят модули решения задач о процессах, происходящих в камерах сгорания РДТТ (А.Д. Рычков, О.Б. Ковалев) и при внешнем обтекании тупых и заостренных частей (А.П. Шашкин, В.Ф. Волков).

Пакет "Зеркало" (А.Н. Коновалов с сотрудниками) предназначен для решения задач о поведении вязко-упругих сред с теплопроводностью под действием механических и тепловых нагрузок.

Пакеты KRUG-24, KRUG-34 созданы для расчета соответственно двумерных и трехмерных задач высокоскоростного соударения деформируемых тел (В.М. Фомин, А.И. Гулидов, И.И. Шабалин).

За работы по математическому моделированию практически важных проблем ряд сотрудников ИТПМ стали лауреатами премий: В.М. Фомин, И.К. Яушев (1981 г.), А.Д. Рычков (1985 г.) - Государственная премия СССР; А.И. Гулидов, Г.А. Сапожников, В.М. Фомин, И.И. Шабалин (1990 г.) - премия Совета Министров СССР; Е.В. Ворожцов, А.И. Гулидов (1977 г.), А.Г. Марчук, Л.Б. Чубаров (1981 г.) - премия Ленинского Комсомола.