

# **ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛЕЖАНДРА. ГАЗОВАЯ ДИНАМИКА.**

**С.К. Годунов**

**Новосибирск, 2013**

# Преобразование Лежандра

Зададим некоторую пару групп переменных

$$q_1, q_2, \dots, q_N$$

$$p_1, p_2, \dots, p_N, \quad p_j = p_j(q_1, q_2, \dots, q_N)$$

и предположим, что следующая сумма является полным дифференциалом

$$\sum_{i=1}^N q_i dp_i \equiv q_i dp_i = dH(p_1, p_2, \dots, p_N)$$

$$q_i = H_{p_i}(p_1, p_2, \dots, p_N)$$
$$dq_i = H_{p_i p_j} dp_j$$

В матричном виде:

$$\begin{pmatrix} dq_1 \\ dq_2 \\ \vdots \\ dq_N \end{pmatrix} = \left\{ H_{p_i p_j} \right\} \begin{pmatrix} dp_1 \\ dp_2 \\ \vdots \\ dp_N \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} dp_1 \\ dp_2 \\ \vdots \\ dp_N \end{pmatrix} = \left\{ H_{p_i p_j} \right\}^{-1} \begin{pmatrix} dq_1 \\ dq_2 \\ \vdots \\ dq_N \end{pmatrix}$$

# Преобразование Лежандра

Сделаем преобразование Лежандра от функции  $H$

$$L = p_i H_{p_i} - H$$

Нетрудно убедиться, что:  $dL = p_i dH_{p_i} + H_{p_i} dp_i - H_{p_i} dp_i = p_i dH_{p_i} = p_i dq_i$

Представив  $L$  как функцию от  $q_1, \dots, q_N$ :  $L = L(q_1, \dots, q_N)$

$$dL = L_{q_i} dq_i = p_i dq_i \quad \left| \begin{array}{l} dH = H_{p_i} dp_i \end{array} \right.$$

$$p_i = L_{q_i}(q_1, \dots, q_N) \quad \left| \begin{array}{l} q_i = H_{p_i} \end{array} \right.$$

$$dp_i = L_{q_i q_j} dq_j$$

Важное следствие связывает функции  $L$  и  $H$ :

$$\begin{pmatrix} dp_1 \\ \vdots \\ dp_N \end{pmatrix} = \{L_{q_i q_j}\} \begin{pmatrix} dq_1 \\ \vdots \\ dq_N \end{pmatrix} = \{H_{p_k p_l}\}^{-1} \begin{pmatrix} dq_1 \\ \vdots \\ dq_N \end{pmatrix}$$

Дифференциалы  $dp_i$  и  $dq_j$  связаны симметричными матрицами

# Преобразование Лежандра

Представим  $L$  как функцию от  $q_1, \dots, q_N$  :  $L = L(q_1, \dots, q_N)$

$$dL = L_{q_i} dq_i = p_i dq_i \quad \left| \left( dH = H_{p_i} dp_i \right) \right.$$

$$p_i = L_{q_i}(q_1, \dots, q_N) \quad \left| \left( q_i = H_{p_i} \right) \right.$$

$$dp_i = L_{q_i q_j} dq_j$$

**Обобщение** предыдущих слайдов на **несколько потенциалов**  $H^m$ :

$$\sum_{i=1}^N q_i^m dp_i^m \equiv q_i^m dp_i^m = dH^m(p_1^m, p_2^m, \dots, p_N^m)$$

$$q_i^m = H_{p_i^m}^m \quad dq_i^m = H_{p_i^m p_j^m}^m dp_j^m \quad L^m = p_i^m H_{p_i^m}^m - H^m \quad dL^m = p_i^m dq_i^m$$



# Построение гиперболической системы

Обобщение предыдущих слайдов на несколько потенциалов  $H^m$ :

$$\sum_{i=1}^N q_i^m dp_i^m \equiv q_i^m dp_i^m = dH^m(p_1^m, p_2^m, \dots, p_N^m)$$

$$q_i^m = H_{p_i^m}^m \quad dq_i^m = H_{p_i^m p_j^m}^m dp_j^m \quad L^m = p_i^m H_{p_i^m}^m - H^m \quad dL^m = p_i^m dq_i^m$$

Рассмотрим систему уравнений:

$$q_i^m \times \left| \frac{\partial p_i^1}{\partial x^1} + \frac{\partial p_i^2}{\partial x^2} + \dots + \frac{\partial p_i^N}{\partial x^N} = 0 \right. \quad \text{где} \quad p_i^m = p_i^m(q_1^m, \dots, q_N^m)$$

Имеет место тождество:

$$q_i^m \frac{\partial p_i^m}{\partial x^m} = \frac{\partial H^m}{\partial x^i} = 0 \quad \text{где} \quad H^m = H^m(p_1^m, \dots, p_N^m)$$

# Построение гиперболической системы

Систему уравнений  $\frac{\partial p_i^m}{\partial x^m} = 0$  и тождество  $q_i^m \frac{\partial p_i^m}{\partial x^m} = \frac{\partial H^m}{\partial x^i} = 0$

можно переписать в следующих видах:

**Уравнения**  $\frac{\partial L_{q_i^m}^m}{\partial x^m} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad L_{q_i^m q_k^m}^m \frac{\partial q_k^m}{\partial x^m} = 0$

Матрица коэффициентов симметрична

**Тождество**  $q_i^m \frac{\partial p_i^m}{\partial x^m} = \frac{\partial H^m}{\partial x^i} \equiv \frac{\partial \left( q_i^m L_{q_i^m}^m - L^m \right)}{\partial x^m} = 0$

Справедливость тождества **следует** из уравнений **на гладких решениях**.

# Построение гиперболической системы

В результате в переменных  $t$  и  $x$  получим систему уравнений вида:

$$\frac{\partial L_{q_i}}{\partial t} + \frac{\partial M_{q_i}^k}{\partial x_k} = 0$$

И дополнительный закон сохранения:

$$\frac{\partial (q_i L_{q_i} - L)}{\partial t} + \frac{\partial (q_i M_{q_i}^k - M^k)}{\partial x_k} = 0$$

В случае выпуклой функции  $L(q_1, \dots, q_n)$

$$L_{q_i q_j} \frac{\partial q_j}{\partial t} + M_{q_i q_j}^k \frac{\partial q_j}{\partial x^k} = 0$$

На основе записанной в таком виде системы уравнений решается последовательность одномерных задач Римана, которые в дальнейшем используются в исходных системах уравнений (законах сохранения)

5 независимых величин

$$u^1, u^2, u^3, \rho = \frac{1}{V}, S$$

Уравнение состояния

$$E = E(S, V)$$

$$p = -E_V, \quad T = E_S$$

$$dE + pdV = TdS$$

Основные дифференциальные уравнения

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^k)}{\partial x^k} = 0$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\delta_i^k p + \rho u_i u^k)}{\partial x^k} = 0$$

$$\frac{\partial(\rho S)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^k S)}{\partial x^k} = 0$$

Дополнительное уравнение – следствие основных

$$\frac{\partial \left( \rho E + \rho \frac{u_i u^i}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^k \left( E + \frac{p}{\rho} + \frac{u_i u^i}{2} \right)}{\partial x^k} = 0$$

## Удобная параметризация

$$L = p, \quad L^k = u^k L = u^k p \quad \text{Термодинамические потенциалы}$$

$$q^i = u^i, \quad q = E + pV - TS - \frac{u_i u^i}{2}, \quad q^* = T \quad \text{Независимые величины}$$

## Термодинамические соотношения

$$\begin{aligned} dL &= \rho d(E + pV - TS) + \rho S dT = \\ &= \rho d\left(E + pV - TS - \frac{u_i u^i}{2}\right) + \rho u^i du_i + \rho S dT = \\ &= \rho dq + \rho u^i dq_i + \rho S dq^* \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} dL^{(k)} &= \rho u^k d\left(E + pV - TS - \frac{u_i u^i}{2}\right) + (\rho u^i u^k + \delta^{ik} p) du_i + \rho S u^k dT = \\ &= \rho u^k dq + (\rho u^i u^k + \delta^{ik} p) dq_i + \rho S u^k dq^* \end{aligned}$$

Основные дифференциальные уравнения

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^k)}{\partial x^k} = 0$$

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\delta_i^k p + \rho u_i u^k)}{\partial x^k} = 0$$

$$\frac{\partial (\rho S)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^k S)}{\partial x^k} = 0$$

Дополнительное уравнение – следствие основных

$$\frac{\partial \left( \rho E + \rho \frac{u_i u^i}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k \left( E + \frac{p}{\rho} + \frac{u_i u^i}{2} \right)}{\partial x^k} = 0$$

Формализация (Годунов 1960-1962)

Основные уравнения

Множители	{	$q$	$\frac{\partial L_q}{\partial t} + \frac{\partial L_q^{(k)}}{\partial x^k} = 0$	$q = E + pV - TS - \frac{u_i u^i}{2}$
		$q_i$	$\frac{\partial L_{q_i}}{\partial t} + \frac{\partial L_{q_i}^{(k)}}{\partial x^k} = 0$	$q^i = u^i$
		$q^*$	$\frac{\partial L_{q^*}}{\partial t} + \frac{\partial L_{q^*}^{(k)}}{\partial x^k} = 0$	$q^* = T$

Сумма произведений  
(уравнение следствие)

$$\frac{\partial (qL_q + q_i L_{q_i} + q^* L_{q^*} - L)}{\partial t} + \frac{\partial (qL_q^{(k)} + q_i L_{q_i}^{(k)} + q^* L_{q^*}^{(k)} - L^{(k)})}{\partial x^k} = 0$$

$$\left( \frac{\partial \left( \rho E + \rho \frac{u_i u^i}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^k \left( E + \frac{p}{\rho} + \frac{u_i u^i}{2} \right)}{\partial x^k} = 0 \right)$$

## Симметрическая форма

$$\frac{\partial L_q}{\partial t} + \frac{\partial L_q^{(k)}}{\partial x^k} = 0$$

$$\frac{\partial L_{q_i}}{\partial t} + \frac{\partial L_{q_i}^{(k)}}{\partial x^k} = 0$$

$$\frac{\partial L_{q^*}}{\partial t} + \frac{\partial L_{q^*}^{(k)}}{\partial x^k} = 0$$

Симметрическая гиперболическая форма этих уравнений

если  $L(q, q^1, q^2, q^3, q^*)$  – **выпуклая функция**

$$\begin{pmatrix} L_{qq} & L_{qq^1} & L_{qq^2} & L_{qq^3} & L_{qq^*} \\ L_{q^1q} & L_{q^1q^1} & L_{q^1q^2} & L_{q^1q^3} & L_{q^1q^*} \\ L_{q^2q} & L_{q^2q^1} & L_{q^2q^2} & L_{q^2q^3} & L_{q^2q^*} \\ L_{q^3q} & L_{q^3q^1} & L_{q^3q^2} & L_{q^3q^3} & L_{q^3q^*} \\ L_{q^*q} & L_{q^*q^1} & L_{q^*q^2} & L_{q^*q^3} & L_{q^*q^*} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} q \\ q^1 \\ q^2 \\ q^3 \\ q^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} L^{(k)}_{qq} & L^{(k)}_{qq^1} & L^{(k)}_{qq^2} & L^{(k)}_{qq^3} & L^{(k)}_{qq^*} \\ L^{(k)}_{q^1q} & L^{(k)}_{q^1q^1} & L^{(k)}_{q^1q^2} & L^{(k)}_{q^1q^3} & L^{(k)}_{q^1q^*} \\ L^{(k)}_{q^2q} & L^{(k)}_{q^2q^1} & L^{(k)}_{q^2q^2} & L^{(k)}_{q^2q^3} & L^{(k)}_{q^2q^*} \\ L^{(k)}_{q^3q} & L^{(k)}_{q^3q^1} & L^{(k)}_{q^3q^2} & L^{(k)}_{q^3q^3} & L^{(k)}_{q^3q^*} \\ L^{(k)}_{q^*q} & L^{(k)}_{q^*q^1} & L^{(k)}_{q^*q^2} & L^{(k)}_{q^*q^3} & L^{(k)}_{q^*q^*} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^k} \begin{pmatrix} q \\ q^1 \\ q^2 \\ q^3 \\ q^* \end{pmatrix} = 0$$

# Моделирование релятивистской гидродинамики

$$(g_{\alpha\beta}) = (g^{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad u = \begin{cases} (u^0, u^1, u^2, u^3) \\ (u_0, u_1, u_2, u_3) = (-u^0, u^1, u^2, u^3) \end{cases} \quad \begin{matrix} q = -u_\alpha u^\alpha \\ r \\ \theta \end{matrix} \quad \begin{matrix} \text{Скаляры} \end{matrix}$$

Термодинамический потенциал  $L = L(q, r, \theta)$

$$\begin{array}{l|l} u^\alpha & \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_{u^\alpha} = f_\alpha \\ r & \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_r = 0 \\ \theta & \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_\theta = 0 \end{array} \quad (u^\alpha f_\alpha \equiv 0, \text{ если } f_\alpha - \text{ сила Лоренца})$$

Уравнение следствие

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} [u^\beta (2qL_q + rL_r + \theta L_\theta)] = u^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_{u^\alpha} + r \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_r + \theta \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_\theta = u^\alpha f_\alpha = 0$$



$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_{u^\alpha} \equiv \frac{\partial T_\alpha^\beta}{\partial x^\beta} = f_\alpha \quad (T_\alpha^\beta - \text{тензор энергии-импульса,}$$

$T_0^0$  – плотность энергии)

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_r = 0$$

– сохранение заряда

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_\theta = 0$$

– сохранение энтропии

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} [u^\beta (2qL_q + rL_r + \theta L_\theta)] = 0 \quad - \text{сохранение плотности}$$

«Трёхмерные» обозначения:

$$v_k = v^k = u^k / u^0, \quad k = 1, 2, 3$$

$$\frac{u^0}{\sqrt{q}} = \frac{1}{\sqrt{1-|v|^2}}, \quad \frac{u^k}{\sqrt{q}} = \frac{v^k}{\sqrt{1-|v|^2}},$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_{u^\alpha} \equiv \frac{\partial T_\alpha^\beta}{\partial x^\beta} = f_\alpha, \quad T_0^0 - \text{плотность энергии}$$

$$T_0^0 = \delta_\alpha^\beta L + \frac{u^\beta u_\alpha}{-u^\gamma u_\gamma} 2qL_q$$

$$p = L, \quad e + p = 2qL_q \quad (\text{Ландау, Лифшиц})$$

$$T_0^0 = p - \frac{e + p}{1-|v|^2} = -\frac{e + |v|^2 p}{1-|v|^2} \quad (T_{00} = \frac{e + |v|^2 p}{1-|v|^2})$$

$$T_\alpha^\beta = \delta_\alpha^\beta L + \begin{cases} -\frac{1}{1-|v|^2} 2qL_q, & \alpha = 0, \beta = 0 \\ \frac{v^\beta}{1-|v|^2} 2qL_q, & \alpha = 0, \beta \neq 0 \\ -\frac{v_\alpha}{1-|v|^2} 2qL_q, & \alpha \neq 0, \beta = 0 \\ \frac{v_\alpha v^\beta}{1-|v|^2} 2qL_q, & \alpha \neq 0, \beta \neq 0 \end{cases}$$

$$\rho = \sqrt{q}(2qL_q + rL_r + \theta L_\theta)$$

$$\sqrt{q}L_\theta = \rho S, \quad \sqrt{q}L_r = R$$

энтропия      заряд

$$\frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\rho}{\sqrt{1-|v|^2}} \right) + \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \frac{v^k \rho}{\sqrt{1-|v|^2}} \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} [u^\beta (2qL_q + rL_r + \theta L_\theta)] = 0 \quad \text{Сохранение инертной массы (Фок)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\rho S}{\sqrt{1-|v|^2}} \right) + \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \frac{v^k \rho S}{\sqrt{1-|v|^2}} \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_\theta = 0 \quad - \text{сохранение энтропии}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\rho R}{\sqrt{1-|v|^2}} \right) + \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \frac{v^k \rho R}{\sqrt{1-|v|^2}} \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_r = 0 \quad - \text{сохранение заряда}$$

## Сравнение с классикой:

### Тензор энергии-импульса

$$T_{\alpha}^{\beta} = (u^{\beta} L)_{u^{\alpha}} = \delta_{\alpha}^{\beta} L + \frac{u^{\beta} u_{\alpha}}{-u^{\gamma} u_{\gamma}} 2q L_q$$

$(-u^{\gamma} u_{\gamma} = q)$

Совпадает с формулой из Ландау, Лифшиц  
«Механика сплошных сред» 1954, стр. 607,  
если положить  $L = p$ ,  $2qLq = e + p$

$$T_0^0 = p - \frac{(e + p)}{1 - |v|^2}$$

---

### Уравнение для плотности

$$\frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\rho}{\sqrt{1 - |v|^2}} \right) + \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \frac{v^k \rho}{\sqrt{1 - |v|^2}} \right) = 0$$

Закон сохранения плотности в  
лабораторной системе координат  
(Фок, «Теория пространства времени и  
тяготения» стр. 141)


# Одномерные уравнения газовой динамики

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

$$p = -E_V(V, S) \quad p_V = -E_{VV}(V, S) \quad [V(p, S)]_p = -\frac{1}{E_{VV}(V, S)} = -\frac{1}{a^2(V, S)}$$

$\begin{aligned} \left[ \rho_0 E(V, S) + \frac{\rho_0 u^2}{2} \right]_u &= \rho_0 u \times \\ - \left[ \rho_0 E(V, S) + \frac{\rho_0 u^2}{2} \right]_V &= p \times \\ \left[ \rho_0 E(V, S) + \frac{\rho_0 u^2}{2} \right]_S &= T \times \end{aligned}$	$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial V}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= 0 \end{aligned}$	I
$\frac{\partial \rho_0 \left( E + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial p u}{\partial m} = 0$		

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial m} &= 0 \\ \frac{1}{a^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= 0 \end{aligned}$$



II

$$u \pm \frac{p}{a}, S$$

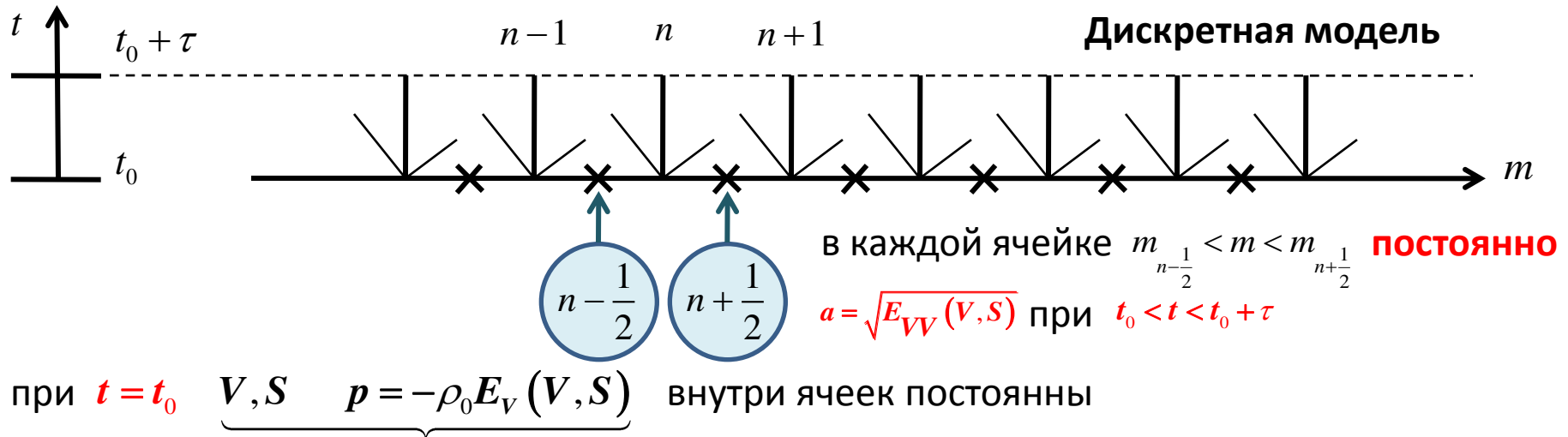
римановы инварианты

Если предположить, что  $a = \sqrt{E_{VV}(V, S)} = \text{const}$  то система II перепишется в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( u + \frac{p}{a} \right) + a \frac{\partial}{\partial m} \left( u + \frac{p}{a} \right) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( u - \frac{p}{a} \right) - a \frac{\partial}{\partial m} \left( u - \frac{p}{a} \right) &= 0 \end{aligned} \quad \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

Эти соображения используются при конструировании **дискретной вычислительной модели**

# Одномерные уравнения газовой динамики



Распады разрывов  $p = P_n$   $u = U_n$  (на границах ячеек) находятся из уравнений

$$U_n + \frac{1}{a_{n-\frac{1}{2}}} P_n = u_{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{a_{n-\frac{1}{2}}} p_{n-\frac{1}{2}}$$

$$U_n - \frac{1}{a_{n+\frac{1}{2}}} P_n = u_{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{a_{n+\frac{1}{2}}} p_{n+\frac{1}{2}}$$

и продолжаются кусочно-постоянными значениями  $u, p, V, S$  внутри ячеек при  $t_0 < t < t_0 + \tau$

При  $t = t_0 + \tau$  в ячейках находятся

$$u^{n+\frac{1}{2}} = u_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\tau}{m_{n+1} - m_n} (P_{n+1} - P_n)$$

$$V^{n+\frac{1}{2}} = V_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{m_{n+1} - m_n} (U_{n+1} - U_n)$$

$u^{n+\frac{1}{2}}$   $V^{n+\frac{1}{2}}$  могут быть **также** получены **усреднением** кусочно-постоянных значений внутри ячейки при  $t = t_0 + \tau$

$$\rho_0 E \left( V^{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}} \right) + \rho_0 \frac{\left( u^{n+\frac{1}{2}} \right)^2}{2} \leq \rho_0 E \left( V_{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}} \right) + \rho_0 \frac{\left( u_{n+\frac{1}{2}} \right)^2}{2} + \frac{\tau}{m_{n+1} - m_n} (P_{n+1} U_{n+1} - P_n U_n)$$

Если  $E(V, S)$  выпукла по  $V$

$$E_S > 0 \quad \text{то} \quad S^{n+\frac{1}{2}} \geq S_{n+\frac{1}{2}}$$

$$\rho_0 E \left( V^{n+\frac{1}{2}}, S^{n+\frac{1}{2}} \right) + \rho_0 \frac{\left( u^{n+\frac{1}{2}} \right)^2}{2} = \rho_0 E \left( V_{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}} \right) + \rho_0 \frac{\left( u_{n+\frac{1}{2}} \right)^2}{2} + \frac{\tau}{m_{n+1} - m_n} (P_{n+1} U_{n+1} - P_n U_n)$$

Если  $E(V, S)$  выпукла по  $V$  то  $E_S > 0$   $S^{n+\frac{1}{2}} \geq S_{n+\frac{1}{2}}$

$$\rho_0 E\left(V^{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_0 \frac{\left(u^{n+\frac{1}{2}}\right)^2}{2} \leq \rho_0 E\left(V_{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_0 \frac{\left(u_{n+\frac{1}{2}}\right)^2}{2} + \frac{\tau}{m_{n+1} - m_n} (P_{n+1} U_{n+1} - P_n U_N)$$

$$\rho_0 E\left(V^{n+\frac{1}{2}}, S^{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_0 \frac{\left(u^{n+\frac{1}{2}}\right)^2}{2} = \rho_0 E\left(V_{n+\frac{1}{2}}, S_{n+\frac{1}{2}}\right) + \rho_0 \frac{\left(u_{n+\frac{1}{2}}\right)^2}{2} + \frac{\tau}{m_{n+1} - m_n} (P_{n+1} U_{n+1} - P_n U_N)$$

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

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

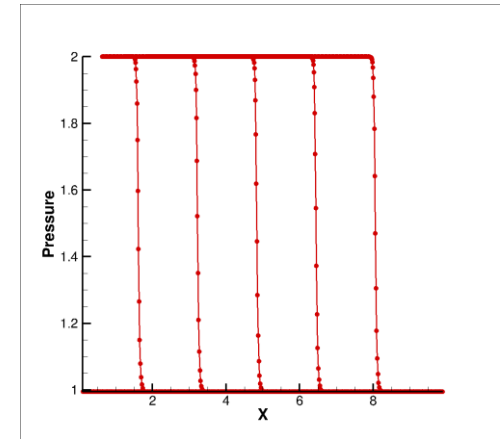
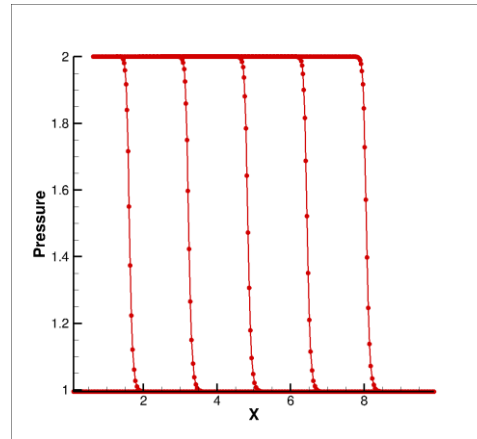
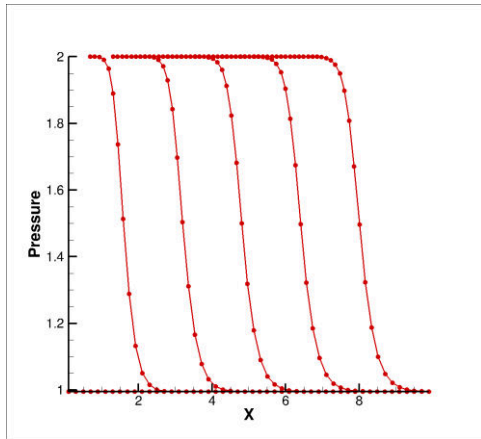
В работе (Годунов, Манузина, Назарьева, ЖВМиМФ, 2011) экспериментально исследовалась слабая сходимость классической схемы Годунова при  $h \rightarrow 0$  и получены порядки точности  $h^{0.8}$  для  $u, V$  и  $h^{0.5}$  для  $S$ .

**В чем причина? (пока не выяснено)**

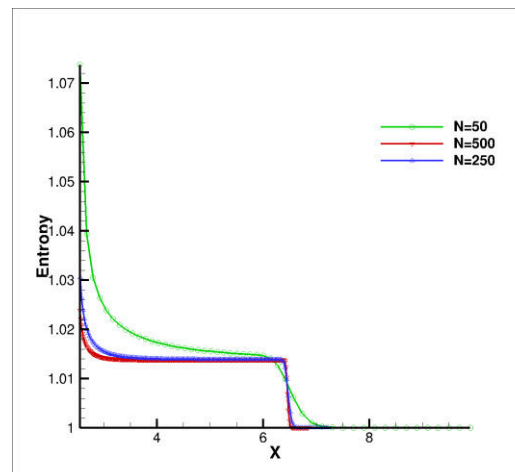
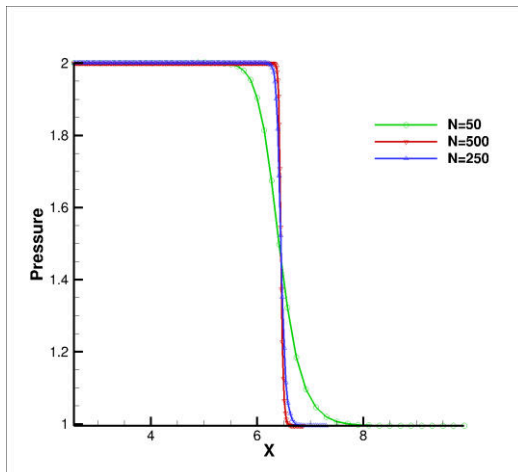
В описанной **выше** модели – число точек, на которые размазывается ударная волна, **зависит от её амплитуды**, но не зависит от **шага сетки**.

**Исследования должны быть продолжены.**

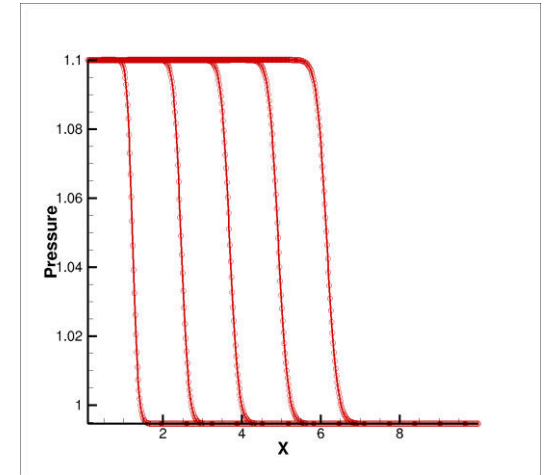
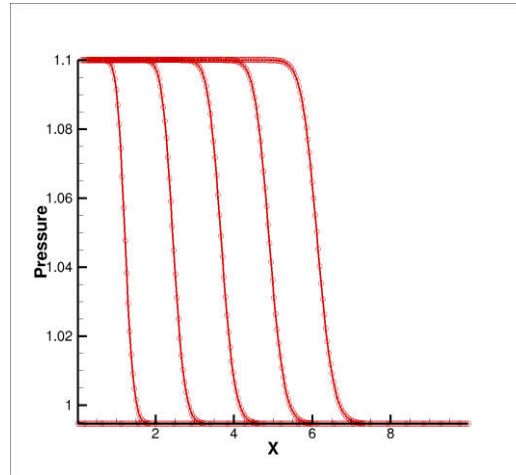
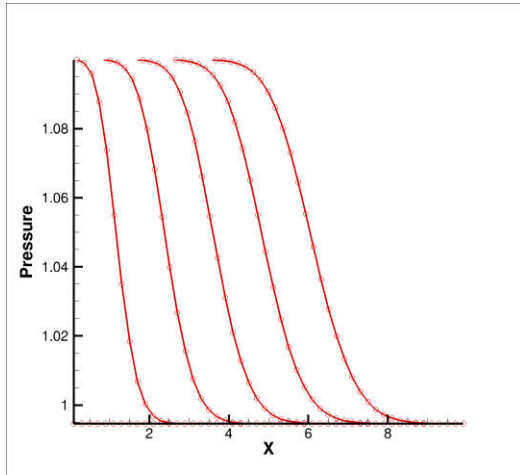
## Поведение давления при измельчении сетки



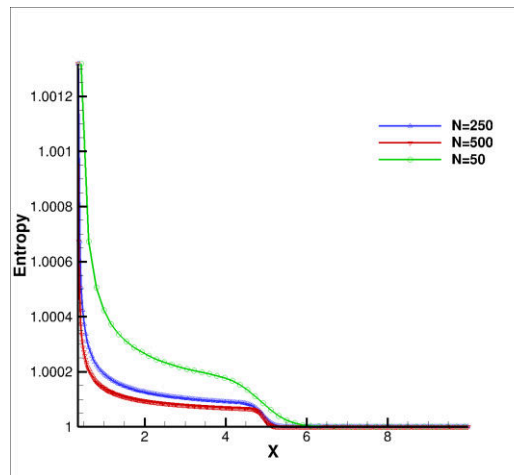
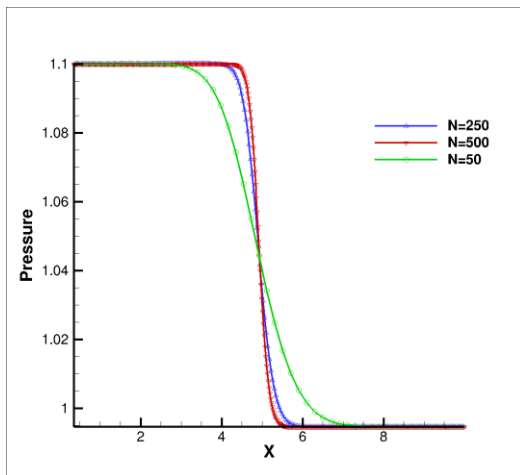
## Сравнение графиков давления и энтропии при измельчении сетки



## Поведение давления при измельчении сетки



## Сравнение графиков давления и энтропии при измельчении сетки





**Спасибо за внимание!**

# УРАВНЕНИЯ МАКСВЕЛЛА

С.К. Годунов

Институт математики им. С.Л. Соболева

Вариант от 10.06.2013

## Уравнения Максвелла

### Первая система

$$\frac{\partial F_{ik}}{\partial x^l} + \frac{\partial F_{kl}}{\partial x^i} + \frac{\partial F_{li}}{\partial x^k} = 0 \quad (i,k,l) = (1,2,3), (2,3,0), (3,0,1), (0,1,2)$$

$$(F_{ik}) = \begin{pmatrix} F_{00} & F_{01} & F_{02} & F_{03} \\ F_{10} & F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{20} & F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{30} & F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix}$$

### Вторая запись той же системы

$$\left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \begin{pmatrix} 0 & B_1 & B_2 & B_3 \\ -B_1 & 0 & -E_3 & E_2 \\ -B_2 & E_3 & 0 & -E_1 \\ -B_3 & -E_2 & E_1 & 0 \end{pmatrix} = (0,0,0,0) \quad (*)$$

### Параметризация той же системы

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \Phi}{\partial x^0} + \frac{\partial A^i}{\partial x^i} &= 0 \\ -\frac{\partial A_i}{\partial x^0} + \frac{\partial \Phi}{\partial x^i} &= E_i \end{aligned} \quad \left| \quad \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial A_3}{\partial x^2} - \frac{\partial A_2}{\partial x^3} \\ \frac{\partial A_1}{\partial x^3} - \frac{\partial A_3}{\partial x^1} \\ \frac{\partial A_2}{\partial x^1} - \frac{\partial A_1}{\partial x^2} \end{pmatrix} \right| \quad \left| \quad \begin{aligned} &\text{отсюда вытекает, что} \quad \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ -B_1 \\ -B_2 \\ -B_3 \end{pmatrix} = 0 \\ &\left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \begin{pmatrix} B_1 \\ 0 \\ E_3 \\ -E_2 \end{pmatrix} = 0 \end{aligned} \right.$$

...

и остальные равенства системы \*

Состоит из равенств

$$\left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \begin{pmatrix} 0 & B_1 & B_2 & B_3 \\ -B_1 & 0 & -E_3 & E_2 \\ -B_2 & E_3 & 0 & -E_1 \\ -B_3 & -E_2 & E_1 & 0 \end{pmatrix} = (0, 0, 0, 0)$$

В которой  $B_i, E_i$  связаны уравнениями

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \Phi}{\partial x^0} + \frac{\partial A^i}{\partial x^i} &= 0 \\ -\frac{\partial A_i}{\partial x^0} + \frac{\partial \Phi}{\partial x^i} &= E_i \end{aligned} \quad \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial A_3}{\partial x^2} - \frac{\partial A_2}{\partial x^3} \\ \frac{\partial A_1}{\partial x^3} - \frac{\partial A_3}{\partial x^1} \\ \frac{\partial A_2}{\partial x^1} - \frac{\partial A_1}{\partial x^2} \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial G^{ik}}{\partial x^k} + J^i = 0 \quad G^{ik} = \begin{pmatrix} 0 & -W_{E_1} & -W_{E_2} & -W_{E_3} \\ W_{E_1} & 0 & W_{B_3} & -W_{B_2} \\ W_{E_2} & -W_{B_3} & 0 & W_{B_1} \\ W_{E_3} & W_{B_2} & -W_{B_1} & 0 \end{pmatrix} \quad - \text{тензор}$$

Его структуру мы сформулируем позднее, когда мы определим лоренцовы инварианты

$$W^{(1)} = \frac{1}{4} g^{ik} F_{kl} g^{lj} F_{ij}$$

$$W^{(2)} = \frac{1}{2} \frac{u^l F_{lm} g^{mj} F_{jk} u^k}{-u_\alpha u^\alpha} = \frac{g^{mj} z_m z_j}{-2u_\alpha u^\alpha}$$

$$\text{где} \quad \begin{pmatrix} z_0 \\ z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

$$W^{(1)} = \frac{B_k B_k - E_k E_k}{2}$$

$v^k$  - трехмерные компоненты скорости

$$W^{(2)} = \frac{E_k E_k + 2\sqrt{1-|v|^2} \begin{vmatrix} E_1 & E_2 & E_3 \\ v^1 & v^2 & v^3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \end{vmatrix}}{2(1-|v|^2)} + \frac{(v^k E_k)^2 + (v^2 B_3 - v^3 B_2)^2 + (v^3 B_1 - v^1 B_3)^2 + (v^1 B_2 - v^2 B_1)^2}{2(1-|v|^2)} \approx E_k E_k \quad (\text{при } |v| \ll 1)$$

$$W = W(W^{(1)}, W^{(2)}, \mu, \varepsilon)$$

$W^{(1)}, W^{(2)}$  - лоренц-инвариантные  
квадратичные формы от  $B_i, E_j$

При ограничительной гипотезе:

$$\varepsilon \equiv const, \mu \equiv const, u^i = const$$

$$2W = E_k W_{E_k} + B_k W_{B_k} - \text{квадратичная форма от } E_i, B_i$$

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}, 1 \right) \begin{pmatrix} 0 & B_1 & B_2 & B_3 \\ -B_1 & 0 & -E_3 & E_2 \\ -B_2 & E_3 & 0 & -E_1 \\ -B_3 & -E_2 & E_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -W_{B_1} & -W_{B_2} & -W_{B_3} \\ W_{B_1} & 0 & W_{E_3} & -W_{E_2} \\ W_{B_2} & -W_{E_3} & 0 & W_{E_1} \\ W_{B_3} & W_{E_2} & -W_{E_1} & 0 \end{pmatrix} + \\ & 0 = \begin{pmatrix} 0 & -W_{E_1} & -W_{E_2} & -W_{E_3} \\ W_{E_1} & 0 & W_{B_3} & -W_{B_2} \\ W_{E_2} & -W_{B_3} & 0 & W_{B_1} \\ W_{E_3} & W_{B_2} & -W_{B_1} & 0 \\ J^0 & J^1 & J^2 & J^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix} = \\ & = \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \begin{pmatrix} 0 & -W_{E_1} & -W_{E_2} & -W_{E_3} \\ W_{E_1} & 0 & W_{B_3} & -W_{B_2} \\ W_{E_2} & -W_{B_3} & 0 & W_{B_1} \\ W_{E_3} & W_{B_2} & -W_{B_1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix} + W_{W^{(1)}} \begin{pmatrix} W^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W^{(1)} \end{pmatrix} + W_{W^{(2)}} \begin{pmatrix} W^{(2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W^{(2)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Сила Лоренца

$$(f_0, f_1, f_2, f_3) = (E_k J^k \mid -E_1 J^0 + J^3 B_2 - J^2 B_3 \mid -E_2 J^0 + J^1 B_3 - J^3 B_1 \mid -E_3 J^0 + J^2 B_1 - J^1 B_2)$$

$$(g_{\alpha\beta}) = (g^{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad u = \begin{cases} (u^0, u^1, u^2, u^3) \\ (u_0, u_1, u_2, u_3) = (-u^0, u^1, u^2, u^3) \end{cases} \quad \begin{matrix} q = -u_\alpha u^\alpha \\ r \\ \theta \end{matrix} \quad \text{Скаляры}$$

$$\text{Термодинамический потенциал} \quad L = L(q, r, \theta)$$

$$\begin{array}{l|l} u^\alpha & \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_{u^\alpha} = f_\alpha \\ r & \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_r = 0 \\ \theta & \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_\theta = 0 \end{array} \quad (u^\alpha f_\alpha \equiv 0, \text{ если } f_\alpha - \text{ сила Лоренца})$$

$$J^k = u^k L_r$$

Уравнение следствие

$$\frac{\partial}{\partial x^\beta} [u^\beta (2qL_q + rL_r + \theta L_\theta)] = u^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_{u^\alpha} + r \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_r + \theta \frac{\partial}{\partial x^\beta} (u^\beta L)_\theta = u^\alpha f_\alpha = 0$$

Сила Лоренца

$$(f_0, f_1, f_2, f_3) = (E_k J^k \mid -E_1 J^0 + J^3 B_2 - J^2 B_3 \mid -E_2 J^0 + J^1 B_3 - J^3 B_1 \mid -E_3 J^0 + J^2 B_1 - J^1 B_2)$$

$$J^k = u^k L_r$$

$$u^k f_k = 0$$

$$\begin{pmatrix}
(W - E_k W_{E_k}) & B_3 W_{E_2} - B_2 W_{E_3} & B_1 W_{E_3} - B_3 W_{E_1} & B_2 W_{E_1} - B_1 W_{E_2} \\
E_2 W_{B_3} - E_3 W_{B_2} & (W - E_1 W_{E_1} - B_2 W_{B_2} - B_3 W_{B_3}) & B_1 W_{B_2} - E_2 W_{E_1} & B_1 W_{B_3} - E_3 W_{E_1} \\
E_3 W_{B_1} - E_1 W_{B_3} & B_2 W_{B_1} - E_1 W_{E_2} & (W - B_1 W_{B_1} - E_2 W_{E_2} - B_3 W_{B_3}) & B_2 W_{B_3} - E_3 W_{E_2} \\
E_1 W_{B_2} - E_2 W_{B_1} & B_3 W_{B_1} - E_1 W_{E_3} & E_3 W_{B_1} - E_1 W_{B_3} & (W - B_1 W_{B_1} - B_2 W_{B_2} - E_3 W_{E_3})
\end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -W_{E_1} & -W_{E_2} & -W_{E_3} \\ W_{E_1} & 0 & W_{B_3} & -W_{B_2} \\ W_{E_2} & -W_{B_3} & 0 & W_{B_1} \\ W_{E_3} & W_{B_2} & -W_{B_1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix} + W_{W^{(1)}} \begin{pmatrix} W^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W^{(1)} \end{pmatrix} + W_{W^{(2)}} \begin{pmatrix} W^{(2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W^{(2)} \end{pmatrix} =$$

$$= \left( G^{ik} F_{kj} - \frac{1}{4} \delta_j^i G^{lm} F_{ml} \right) = (M_j^i)$$

$$(G^{ml} F_{lm} = 2(E_k W_{E_k} + B_k W_{B_k}) = 2(W_{W^{(1)}} [E_k W_{E_k}^{(1)} + B_k W_{B_k}^{(1)}] + W_{W^{(2)}} [E_k W_{E_k}^{(2)} + B_k W_{B_k}^{(2)}]) = 2(W_{W^{(1)}} W^{(1)} + W_{W^{(2)}} W^{(2)}))$$

При наших ограничениях доказано

$$\frac{\partial M_j^i}{\partial x^i} = -J^k F_{kj} = -f_j$$



Итак, при сформулированных ограничениях справедливо равенство

$$\frac{\partial M_j^i}{\partial x^i} = -J^k F_{kj} = -f_j$$

$$(M_j^i) = \left( G^{ik} F_{kj} - \frac{1}{4} \delta_j^i G^{lm} F_{ml} \right) \text{ Тензор Максвелловских натяжений}$$

Закон сохранения энергии-импульса

$$\frac{\partial M_0^i}{\partial x^i} = -f_0 \quad \text{Закон сохранения энергии для электромагнитного поля}$$

$$\begin{pmatrix} (W - E_k W_{E_k}) \\ E_2 W_{B_3} - E_3 W_{B_2} \\ E_3 W_{B_1} - E_1 W_{B_3} \\ E_1 W_{B_2} - E_2 W_{B_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_0^0 \\ M_0^1 \\ M_0^2 \\ M_0^3 \end{pmatrix}$$

**ПОСТУЛАТ:** Эти равенства являются верными и без наложенных ограничений

Рассмотрим случай:

$$W^{(1)} = \frac{B_k B_k - E_k E_k}{2}, \quad k = 1, 2, 3 \quad v_k = v^k$$

$$u^0 = \frac{\sqrt{q}}{\sqrt{1-|v|^2}}, \quad u^k = \frac{v^k \sqrt{q}}{\sqrt{1-|v|^2}}$$

$$W^{(2)} = \frac{E_k E_k + 2\sqrt{1-|v|^2} \begin{vmatrix} E_1 & E_2 & E_3 \\ v^1 & v^2 & v^3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \end{vmatrix}}{2(1-|v|^2)} + \frac{(v_k E_k)^2 + (v^2 B_3 - v^3 B_2)^2 + (v^3 B_1 - v^1 B_3)^2 + (v^1 B_2 - v^2 B_1)^2}{2(1-|v|^2)} \approx E_k E_k$$

Из них составляется **инвариант**:

$$W = \frac{1/\mu}{2} W^{(1)} + \frac{\varepsilon - 1/\mu}{2} W^{(2)}$$

$$W - E_k W_{E_k} \approx \frac{\varepsilon E_k E_k + \frac{1}{\mu} B_k B_k}{2} \quad \text{если } \sqrt{u_k u_k} \ll |u_0|$$

Благодарю за внимание!

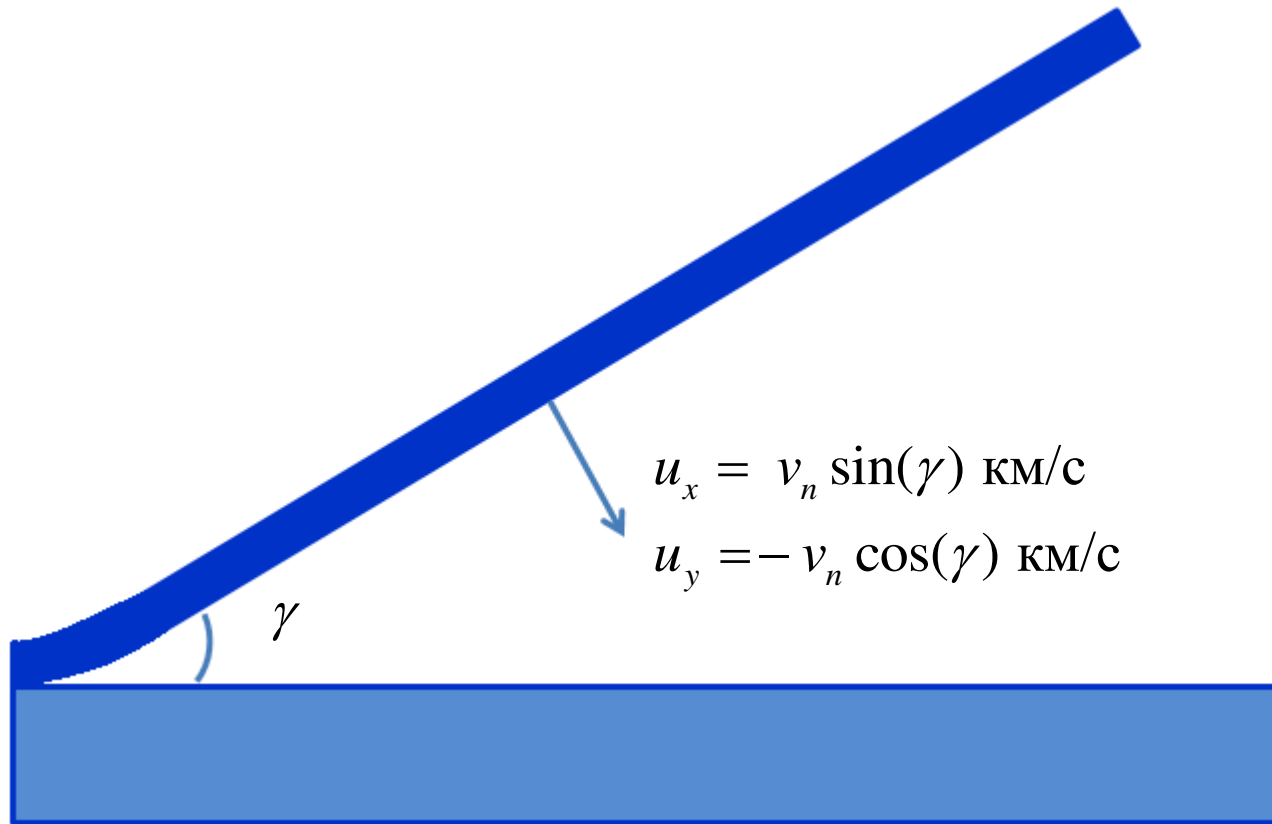
# Моделирование упруго-пластических деформаций

С.К. Годунов

Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН  
Новосибирск  
17 июня 2013 г.

# Постановка задачи о сварке взрывом

Метание верхней пластины осуществляется в результате детонации накрывающего ее слоя ВВ



На этой задаче мы будем демонстрировать результаты модельных расчётов

# Описание деформаций

Эйлеровы координаты:

$$x^i = x^i(\underbrace{\xi_1, \xi_2, \xi_3}_t, t)$$

лагранжевы координаты

$$\left\{ \frac{\partial x^i}{\partial \xi^j} \right\} = \{C_j^i\} = C \quad C|_{t=0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

«Эффективная» деформация

$$D = CB \quad (\det B = 1)$$

остаточная деформация при  $t = 0$

$$\det(C) > 0 \quad \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial \xi^2} & \frac{\partial}{\partial \xi^3} \\ \frac{\partial}{\partial \xi^2} & 0 & -\frac{\partial}{\partial \xi^1} \\ -\frac{\partial}{\partial \xi^3} & \frac{\partial}{\partial \xi^1} & 0 \end{pmatrix} C = 0$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{\partial}{\partial \xi^2} & \frac{\partial}{\partial \xi^3} \\ \frac{\partial}{\partial \xi^2} & 0 & -\frac{\partial}{\partial \xi^1} \\ -\frac{\partial}{\partial \xi^3} & \frac{\partial}{\partial \xi^1} & 0 \end{pmatrix} B \stackrel{?}{=} 0$$

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

Это равенства будут использоваться вместе с уравнениями

$$\frac{\partial B}{\partial t} = 0 \quad !$$

пока не рассматриваются  
пластические деформации

$$\frac{\partial x^i}{\partial t} = u^i$$

для расчета  $D$  и  $C$

# Уравнение состояния

$$E = E^{(0)}(\det CB, S) + E^{(1)}(CB) =$$

$$= \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma(\gamma-1)} \left[ \sigma(S) (\det CB)^{-(\gamma-1)} + (\gamma-1) \det CB \right] + \rho_0 c_1^2 \text{tr} \left[ \sqrt{(CB)(CB)^T} - \frac{1}{3} \text{tr} \left( \sqrt{(CB)(CB)^T} \right) I \right]^2$$

Закон сохранения импульса (**подкорректированный** для учёта остаточных деформаций **B**):

$$\frac{\partial \rho_0 u_i}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[ \rho_0 \mathbf{B}_j^k E_{(CB)_j^k} \right] = 0 \quad \left( \rho_0 \mathbf{B}_j^k E_{(CB)_j^k} = \rho_0 E_{c_j^i} \right)$$

Закон сохранения энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_0 \frac{u^i u_j}{2} + \rho_0 E \right) - \frac{\partial}{\partial \xi^j} \left[ \rho_0 u^i \mathbf{B}_j^k E_{(CB)_j^k} \right] = 0$$

Энтропийное  
неравенство:  $\frac{\partial S}{\partial t} \geq 0$

Энтропия растёт на **разрывных** решениях и при пластических деформациях при изменении **B**

При расчете потоков через границы сеточных ячеек можно использовать уравнение неразрывности.

$$\frac{\partial}{\partial t} \det(CB) = \frac{\partial}{\partial t} \det C = \frac{\partial}{\partial \xi^j} (A_i^j u^i) \quad (A_i^j) = (\det C) C^{-1}$$

Однако, мы пойдём другим путём – **более геометрическим!**

# Максвелловская релаксация

Релаксация напряжений (пластичность) обеспечивается изменением тензора остаточной деформации (по схеме Максвелла)

$$D_j^i = C_k^i B_j^k$$

$$\frac{\partial c_j^i}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} = 0 \quad \frac{\partial B_j^k}{\partial t} = \frac{R_j^k}{\tau} \quad \frac{\partial D_j^i}{\partial t} = \frac{\partial C_k^i B_j^k}{\partial t} - \frac{\partial u^i}{\partial \xi^k} B_j^k + \frac{C_k^i R_j^k}{\tau}$$

**В этом случае корректировка энтропии проводится после изменения  $B$**

Во время этих релаксаций **появляется и меняется кривизна  $u$  поля эффективных деформаций**, описываемых матрицей  $D_j^i = C_k^i B_j^k$

**Следствие:**

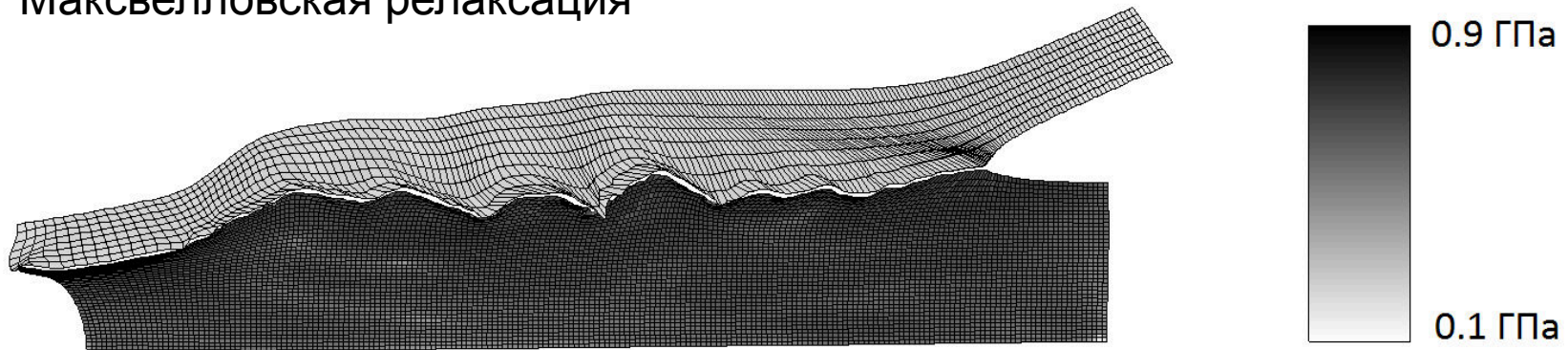
**В поле напряжений появляются моменты.**

Изучается **моментная** теория упругости

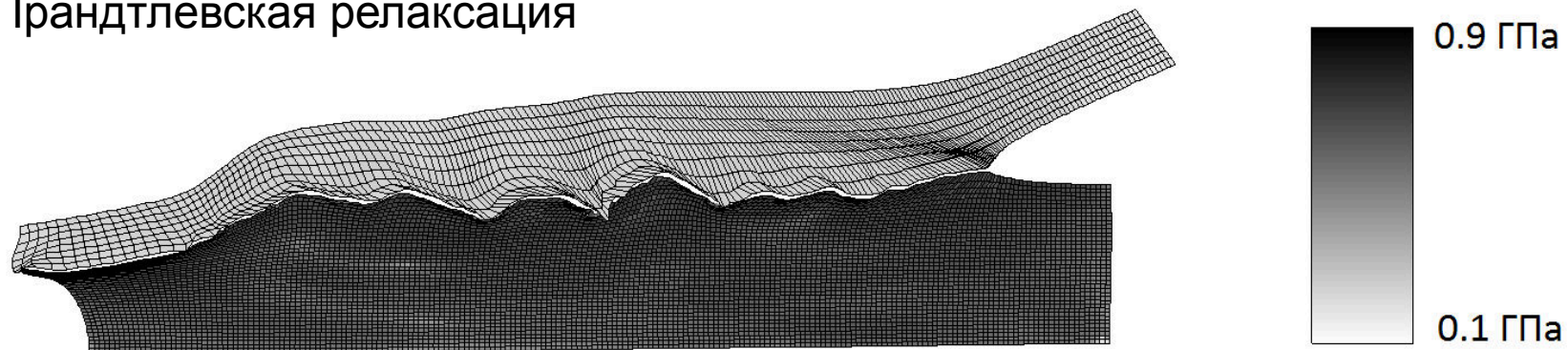


# Максвелловская и Прандтлевская релаксация

Максвелловская релаксация

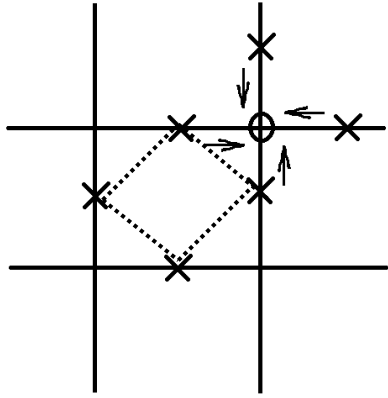


Прандтлевская релаксация

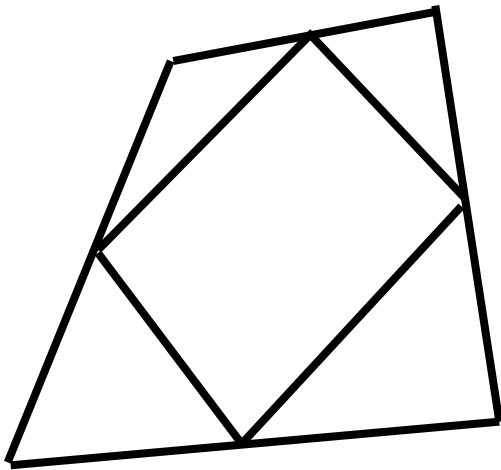


**Имеет место полное совпадение результатов расчета!**

## Расчёт движения точек сетки (двумерный случай)



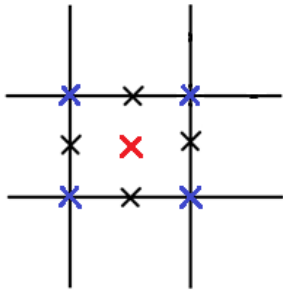
По скоростям, полученным из распадов разрыва на серединах границ между ячейками, осреднением мы получаем скорость угловых точек. По этим угловым точкам определяется их перемещение за шаг по времени и **деформация ячейки** в эйлеровых координатах.



Определяются  $C_{ij}$  по координатам вписанного параллелограмма.

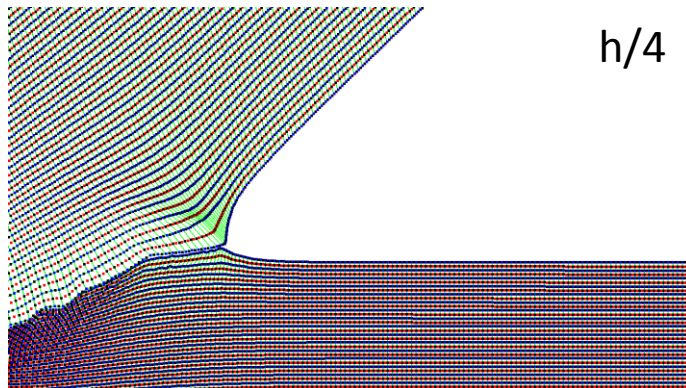
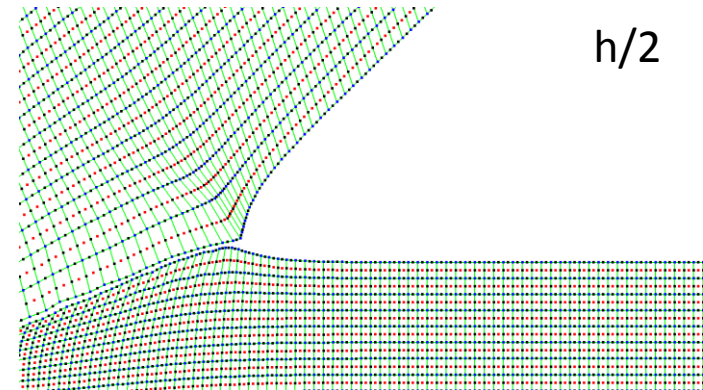
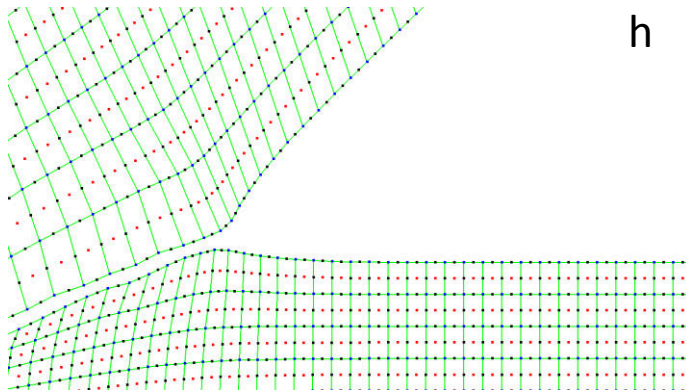
**Проводится контроль геометрических погрешностей, он показан на следующих слайдах**

# Расчёт движения точек сетки (двумерный случай)



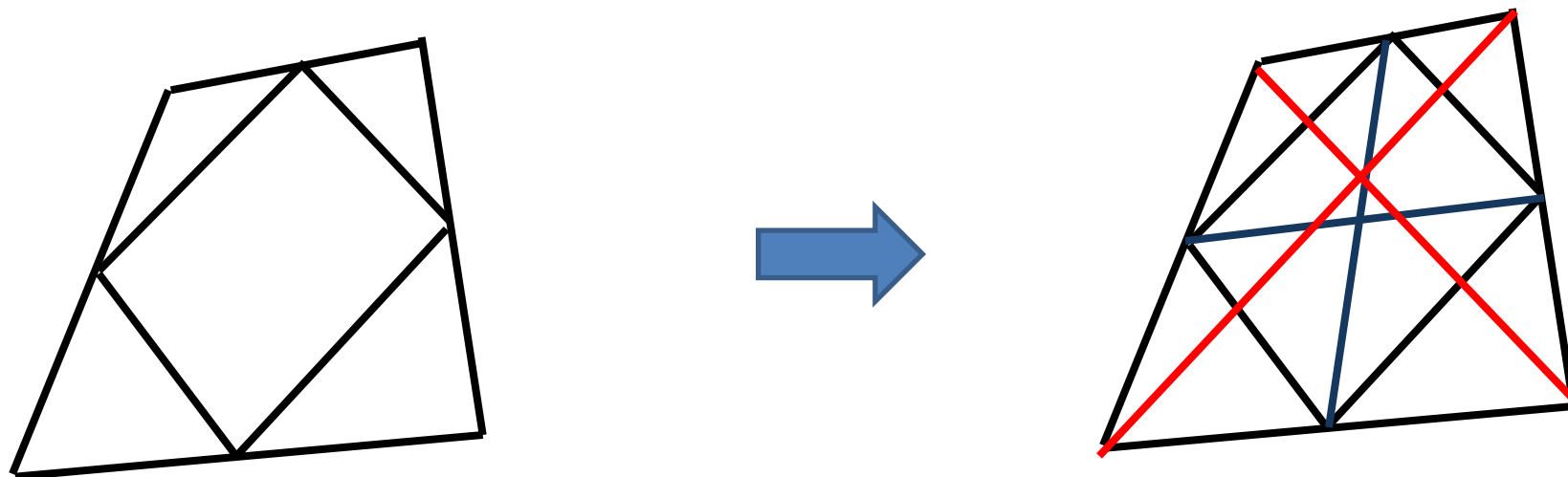
В целом в схеме используются следующие вершины:

1. Угловые точки (движение сетки)
2. Середины ребер (задача «о распаде разрыва»)
3. Середины ячеек (законы сохранения)



**Граница, по которой пластины  
«сварились»,  
на графиках не совпадают.  
На этой границе расстояние между  
соответствующими точками  
верхней и нижней пластин  
пропорционально шагу сетки!**

# Расчет геометрических погрешностей сетки в двумерной задаче

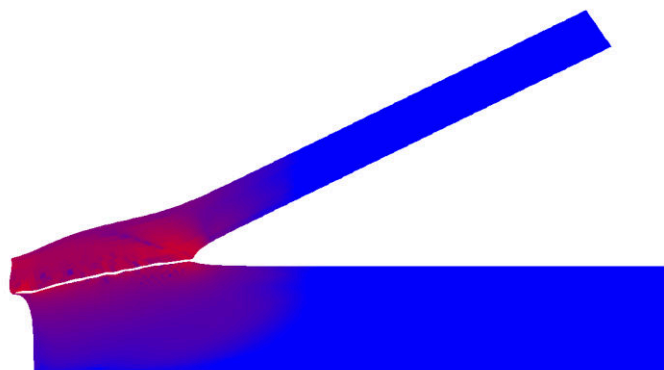


$$\frac{\rho_{\square} - \rho_{\diamond}}{h} \approx 10^{-8}$$

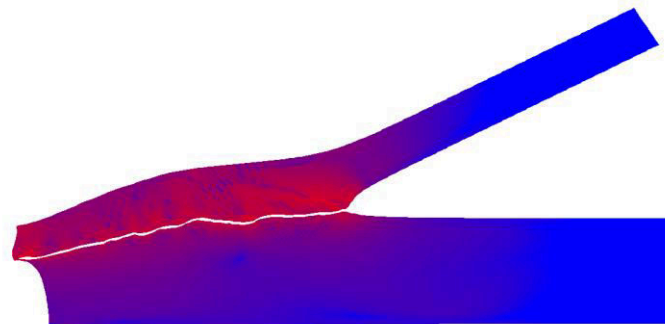
Осуществляется также контроль расстояния  $\rho_{\square} - \rho_{\diamond}$  между «центрами» вписанного параллелограмма и основного четырехугольника.

Аналогичный подход можно осуществить в трехмерном случае

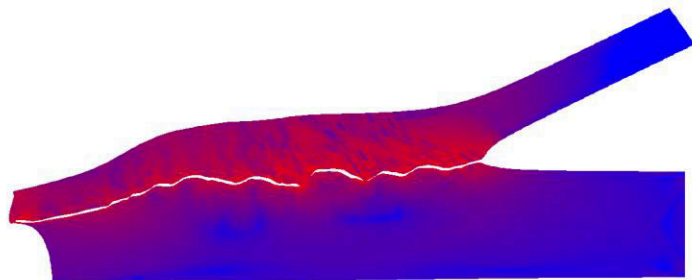
# Расчет геометрических погрешностей сетки в двумерной задаче (расстояние между центрами)



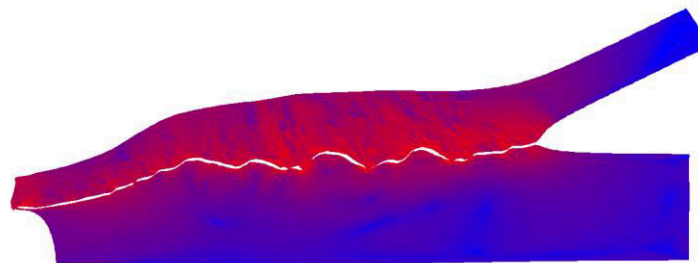
$t = 0.05$



$t = 0.1$



$t = 0.15$



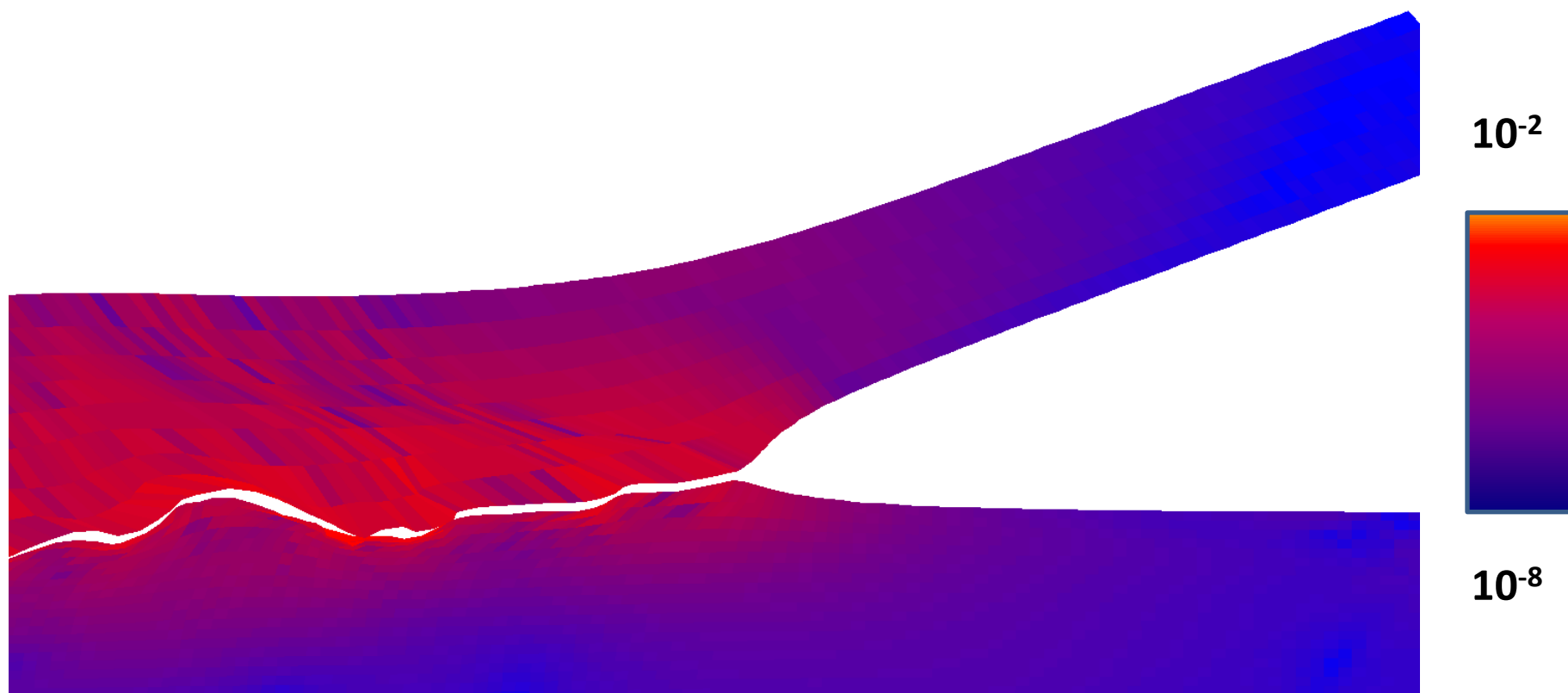
$t = 0.17$

$10^{-2}$

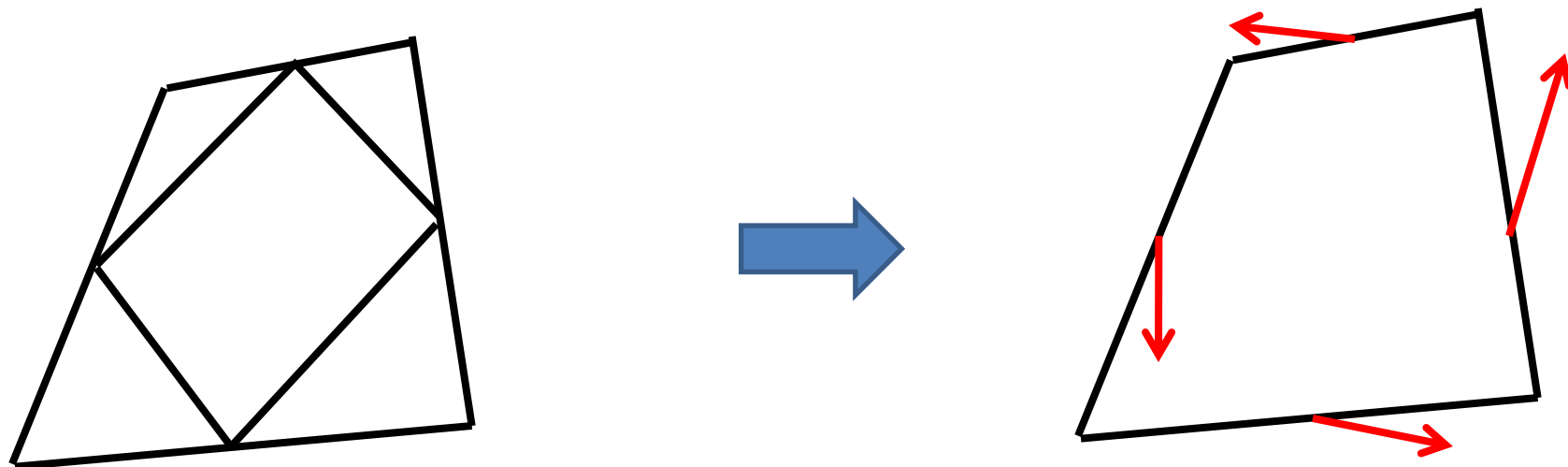


$10^{-8}$

# Расчет геометрических погрешностей сетки в двумерной задаче (расстояние между центрами)



# Расчет геометрических погрешностей сетки в двумерной задаче



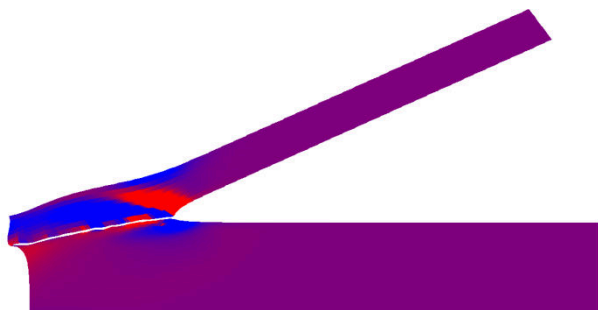
$$\left( \frac{\partial v^2}{\partial \xi^1} - \frac{\partial v^1}{\partial \xi^2} \right) - \left( \frac{\partial U^2}{\partial \xi^1} - \frac{\partial U^1}{\partial \xi^2} \right)$$

Осуществляется также контроль момента количества движения по угловым точкам и центрам ребер

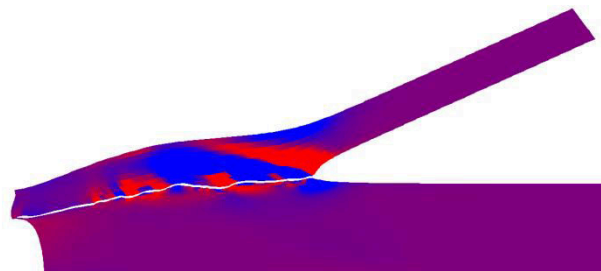
Аналогичный подход можно осуществить в трехмерном случае



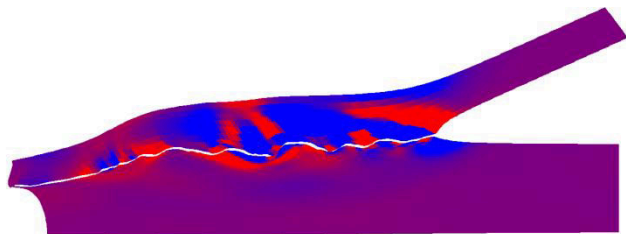
# Расчет геометрических погрешностей сетки в двумерной задаче (момент количества движения)



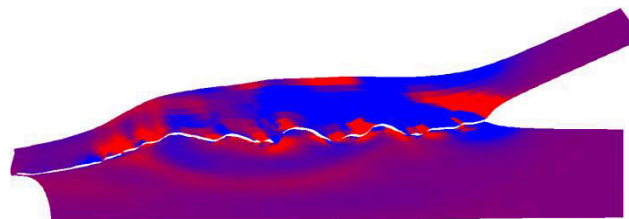
$t = 0.05$



$t = 0.1$



$t = 0.15$



$t = 0.17$

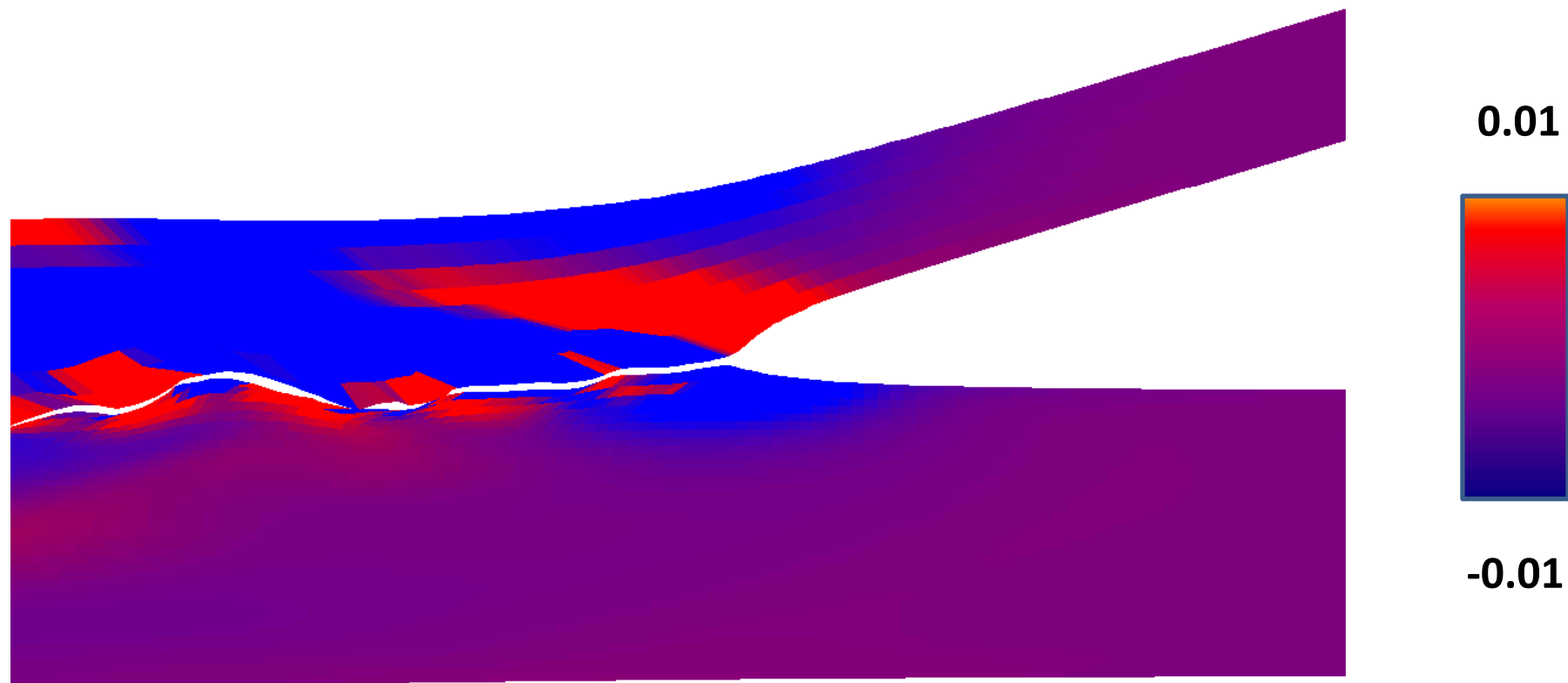
0.01



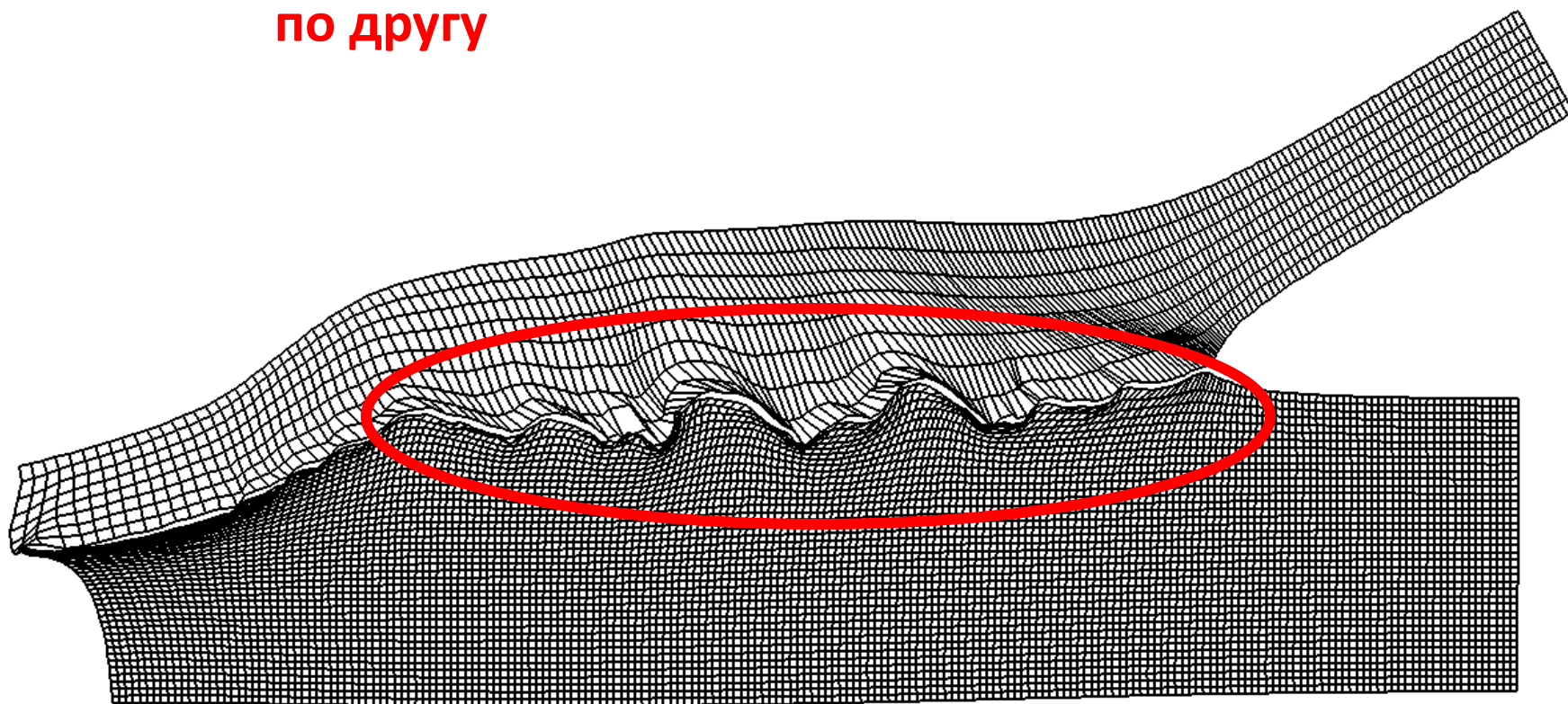
-0.01



# Расчет геометрических погрешностей сетки в двумерной задаче (момент количества движения)

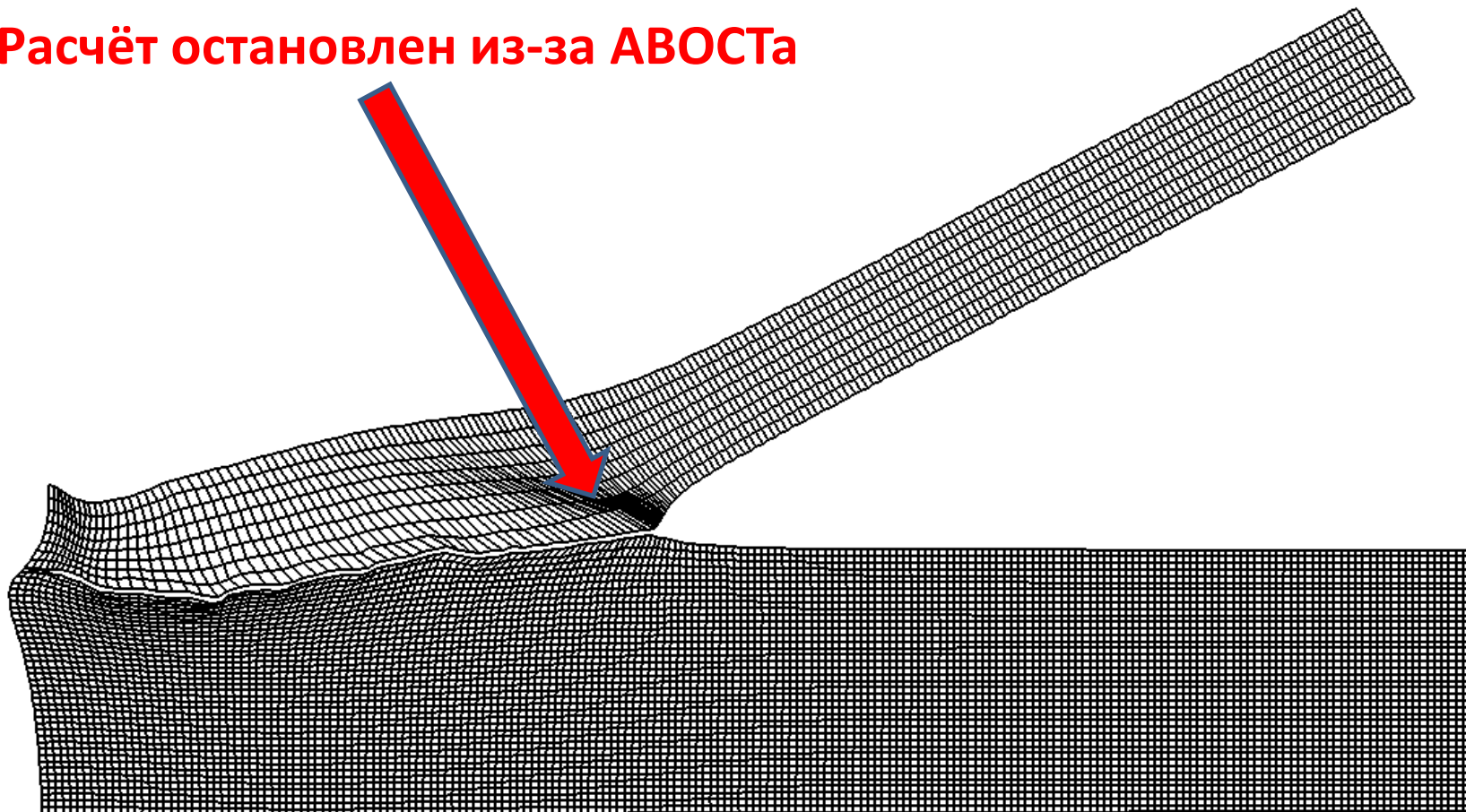


**Границы пластин могут  
«проскальзывать» друг  
по другу**



**Волны при проскальзывании стали крупнее**

## Расчёт остановлен из-за АВОСТА



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

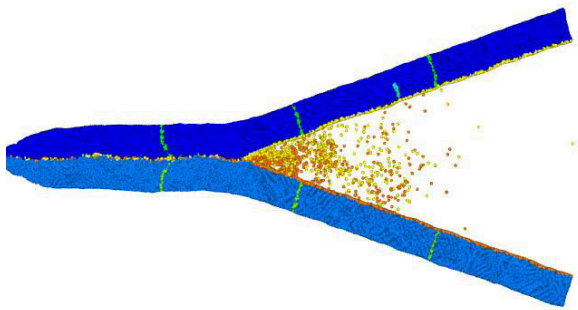
**Причина «АВОСТА» - граница области применимости уравнения состояния**

# Модель молекулярной динамики

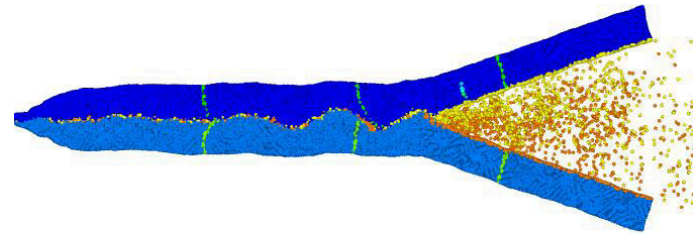
## Волны при соударении алюминиевых пластин, ИТПМ СО РАН

В численном расчете длина волны  $\lambda = 586 \text{ \AA}$ , Расчет длины волны по формуле Кудинова  $\lambda_K = 26\delta \sin^2(\gamma/2) = 624 \text{ \AA}$

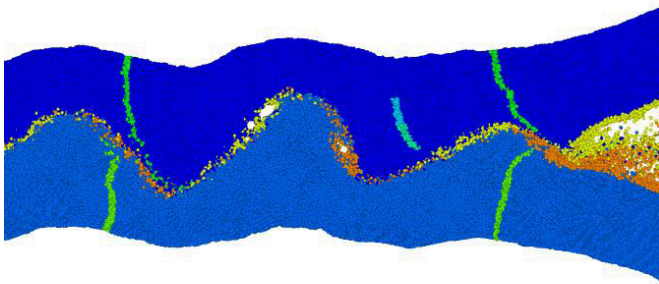
$t = 53 \text{ ps}$



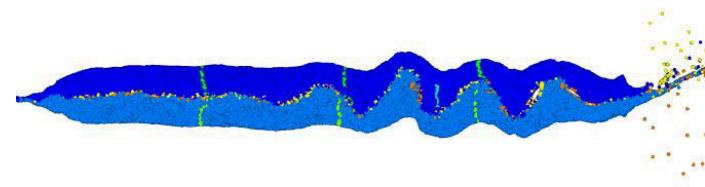
$t = 75 \text{ ps}$



$t = 90 \text{ ps}$



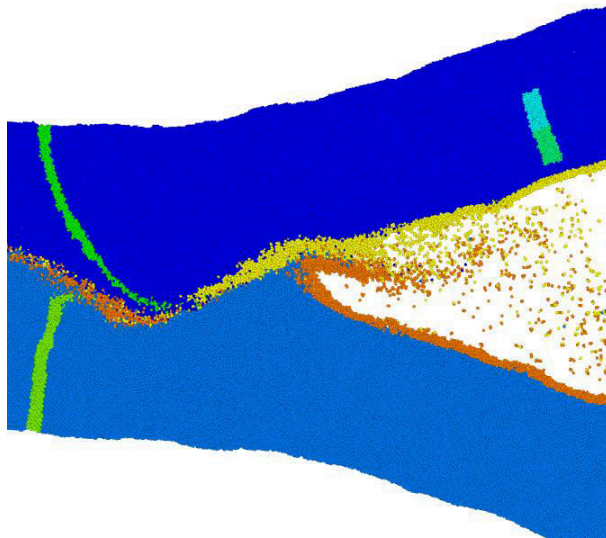
$t = 135 \text{ ps}$



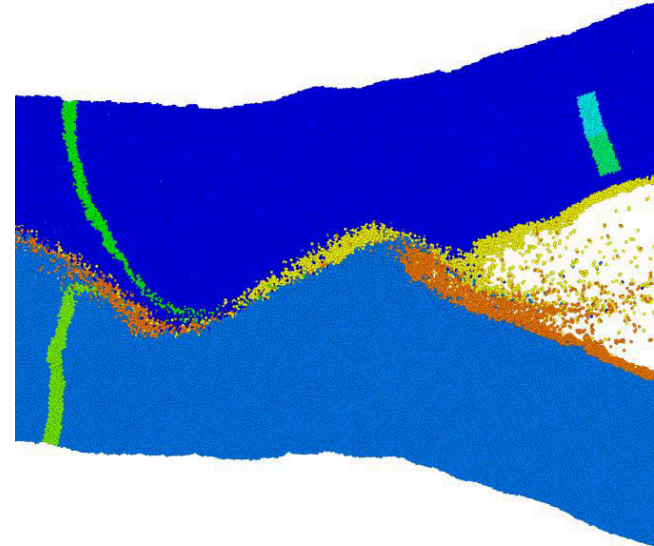
# Модель молекулярной динамики

## Волны при соударении алюминиевых пластин, ИТПМ СО РАН

$t = 71,5 \text{ ps}$



$t = 75 \text{ ps}$



Киселев, Мали, ФГВ, 2012, Т. 48, №2



Рентгеновский снимок во время  
взрывного эксперимента  
(ИГиЛ СО РАН)



# Уравнение состояния в каноническом виде

Пусть имеется сингулярное разложение матрицы

$$D = CB = U \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{pmatrix} V$$

Для близкой матрицы допускается представление:

$$\tilde{D} = U \begin{pmatrix} k_1 + \gamma_1^1 & \gamma_1^2 & \gamma_1^3 \\ \gamma_2^1 & k_2 + \gamma_2^2 & \gamma_2^3 \\ \gamma_3^1 & \gamma_3^2 & k_3 + \gamma_3^3 \end{pmatrix} V = U (K + \Gamma) V$$

Можно доказать, что сингулярные числа для близкой матрицы имеют вид:

$$\tilde{k}_1 = k_1 + \gamma_1^1 + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^2 + \gamma_2^1)^2}{k_1 - k_2} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^2 - \gamma_2^1)^2}{k_1 + k_2} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^3 + \gamma_3^1)^2}{k_1 - k_3} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^3 - \gamma_3^1)^2}{k_1 + k_3} + \dots$$

$$\tilde{k}_2 = k_2 + \gamma_2^2 + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^2 + \gamma_2^1)^2}{k_2 - k_1} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^2 - \gamma_2^1)^2}{k_2 + k_1} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_2^3 + \gamma_3^2)^2}{k_2 - k_3} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_2^3 - \gamma_3^2)^2}{k_2 + k_3} + \dots$$

$$\tilde{k}_3 = k_3 + \gamma_3^3 + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^3 + \gamma_3^1)^2}{k_3 - k_1} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_1^3 - \gamma_3^1)^2}{k_3 + k_1} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_2^3 + \gamma_3^2)^2}{k_3 - k_2} + \frac{1}{4} \frac{(\gamma_2^3 - \gamma_3^2)^2}{k_3 + k_2} + \dots$$

# Уравнение состояния в каноническом виде

Будем рассматривать уравнение состояния, зависящее от инвариантов:

$$E = E\left(\det D, tr DD^T, -\frac{1}{3} tr^2 \sqrt{DD^T}, tr \sqrt{DD^T}, S\right)$$

сделаем разложение в ряд

$$E(k_1 + \gamma_1^1, \gamma_1^2, \dots, k_3 + \gamma_3^3) = E(k_1, 0, \dots, k_3) + \sum_j \gamma_{jj} E_{k_j} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} E_{k_i k_j} \gamma_i^j \gamma_j^i + \\ \rho_0 \sum_{i \neq j} \left[ \left( \frac{1}{2} \frac{E_{k_i} + E_{k_j}}{k_i + k_j} + \frac{1}{2} \frac{E_{k_i} - E_{k_j}}{k_i - k_j} \right) (\gamma_i^j)^2 + 2 \left( \frac{1}{2} \frac{E_{k_i} - E_{k_j}}{k_i - k_j} - \frac{1}{2} \frac{E_{k_i} + E_{k_j}}{k_i + k_j} \right) \gamma_i^j \gamma_j^i + \left( \frac{1}{2} \frac{E_{k_i} + E_{k_j}}{k_i + k_j} + \frac{1}{2} \frac{E_{k_i} - E_{k_j}}{k_i - k_j} \right) (\gamma_j^i)^2 \right] + \dots$$

Выделенные **красным цветом** элементы и накладывают ограничения на положительную определенность квадратичной формы и, как следствие, всего уравнения состояния.

$$\frac{E_{k_i} - E_{k_j}}{k_i - k_j} \geq 0 \quad \frac{E_{k_i} + E_{k_j}}{k_i + k_j} \geq 0 \quad E_{k_i k_j} \geq 0$$

# Уравнение состояния в каноническом виде

Рассмотрим разложение инвариантов по отдельности

$$\begin{aligned} \text{tr}\left(\sqrt{\tilde{D}\tilde{D}^T}\right) &= \text{tr}\left(\tilde{U}\tilde{K}\tilde{U}^T\right) = \tilde{k}_1 + \tilde{k}_2 + \tilde{k}_3 = \\ &= k_1 + k_2 + k_3 + \gamma_1^1 + \gamma_2^2 + \gamma_3^3 + \frac{1}{2} \frac{(\gamma_1^2 - \gamma_2^1)^2}{k_1 + k_2} + \frac{1}{2} \frac{(\gamma_2^3 - \gamma_3^2)^2}{k_2 + k_3} + \frac{1}{2} \frac{(\gamma_1^3 - \gamma_3^1)^2}{k_1 + k_3} + \dots \end{aligned}$$

---

$$\begin{aligned} \left(\text{tr}\left(\sqrt{\tilde{D}\tilde{D}^T}\right)\right)^2 &= (k_1 + k_2 + k_3)^2 + 2(\gamma_1^1 + \gamma_2^2 + \gamma_3^3)(k_1 + k_2 + k_3) + \\ &+ (k_1 + k_2 + k_3) \left( \frac{(\gamma_1^2 - \gamma_2^1)^2}{k_1 + k_2} + \frac{(\gamma_2^3 - \gamma_3^2)^2}{k_2 + k_3} + \frac{(\gamma_1^3 - \gamma_3^1)^2}{k_1 + k_3} \right) + \dots \end{aligned}$$

---

$$\begin{aligned} \text{tr}\tilde{D}\tilde{D}^T &= k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + 2k_1\gamma_1^1 + 2k_2\gamma_2^2 + 2k_3\gamma_3^3 + \\ &+ \left( (\gamma_1^1)^2 + (\gamma_1^2)^2 + (\gamma_1^3)^2 + (\gamma_2^1)^2 + (\gamma_2^2)^2 + (\gamma_2^3)^2 + (\gamma_3^1)^2 + (\gamma_3^2)^2 + (\gamma_3^3)^2 \right) + \dots \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 & \text{tr}[\tilde{D}\tilde{D}^T] - \frac{1}{3} \left( \text{tr} \sqrt{\tilde{D}\tilde{D}^T} \right)^2 = \frac{2}{3} [k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 - k_1k_2 - k_1k_3 - k_2k_3] + \\
 & \frac{2}{3} [(2k_1 - k_2 - k_3)\gamma_1^1 + (2k_2 - k_1 - k_3)\gamma_2^2 + (2k_3 - k_1 - k_2)\gamma_3^3] - \\
 & \frac{1}{3} [(\gamma_1^1)^2 + (\gamma_2^2)^2 + (\gamma_3^3)^2 + 2\gamma_1^1\gamma_2^2 + 2\gamma_1^1\gamma_3^3 + 2\gamma_2^2\gamma_3^3] - \\
 & \frac{1}{3} (k_1 + k_2 + k_3) \left[ \frac{(\gamma_1^2)^2 - 2\gamma_1^2\gamma_2^1 + (\gamma_2^1)^2}{k_1 + k_2} + \frac{(\gamma_2^3)^2 - 2\gamma_2^3\gamma_3^2 + (\gamma_3^2)^2}{k_2 + k_3} + \frac{(\gamma_3^1)^2 - 2\gamma_3^1\gamma_1^3 + (\gamma_1^3)^2}{k_1 + k_3} \right] + \\
 & \left( (\gamma_1^1)^2 + (\gamma_1^2)^2 + (\gamma_1^3)^2 + (\gamma_2^1)^2 + (\gamma_2^2)^2 + (\gamma_2^3)^2 + (\gamma_3^1)^2 + (\gamma_3^2)^2 + (\gamma_3^3)^2 \right) + \dots
 \end{aligned}$$


---

$$\det \tilde{D} = \begin{vmatrix} k_1 + \gamma_1^1 & \gamma_1^2 & \gamma_1^3 \\ \gamma_2^1 & k_2 + \gamma_2^2 & \gamma_2^3 \\ \gamma_3^1 & \gamma_3^2 & k_3 + \gamma_3^3 \end{vmatrix} = k_1k_2k_3 + (k_1k_2\gamma_3^3 + k_1k_3\gamma_2^2 + k_2k_3\gamma_1^1) +$$

$$\left[ k_1(\gamma_2^2\gamma_3^3 - \gamma_2^3\gamma_3^2) + k_2(\gamma_1^1\gamma_3^3 - \gamma_1^3\gamma_3^1) + k_3(\gamma_1^1\gamma_2^2 - \gamma_1^2\gamma_2^1) \right] + \dots$$

## Уравнение состояния в каноническом виде

Для произвольной функции от определителя имеет место:

$$\begin{aligned} F(\det \tilde{D}) &= F(\det D) + F'(\det D) \left[ (k_1 k_2 \gamma_3^3 + k_1 k_3 \gamma_2^2 + k_2 k_3 \gamma_1^1) + \right. \\ &\quad \left. [k_1 (\gamma_2^2 \gamma_3^3 - \gamma_2^3 \gamma_3^2) + k_2 (\gamma_1^1 \gamma_3^3 - \gamma_1^3 \gamma_3^1) + k_3 (\gamma_1^1 \gamma_2^2 - \gamma_1^2 \gamma_2^1)] \right] + \\ &\quad F''(\det D) \left[ (k_1 k_2 \gamma_3^3 + k_1 k_3 \gamma_2^2 + k_2 k_3 \gamma_1^1)^2 \right] \end{aligned}$$

Для примера будем рассматривать два варианта такой функции:

$F_1(\det D) = \frac{\rho_0 c_0^2 \sigma(S)}{\gamma(\gamma-1)} (\det D)^{-(\gamma-1)} + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma} \det D$	$F_2(\det D) = \frac{\rho_0 c_0^2 \sigma(S)}{\gamma(\gamma-1)} (\det D)^{-(\gamma-1)}$
$F_1'(\det D) = -\frac{\rho_0 c_0^2 \sigma(S)}{\gamma} (\det D)^{-\gamma} + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma}$	$F_2'(\det D) = -\frac{\rho_0 c_0^2 \sigma(S)}{\gamma} (\det D)^{-\gamma}$
$F_1''(\det D) = \rho_0 c_0^2 \sigma(S) (\det D)^{-(\gamma+1)}$	$F_2''(\det D) = \rho_0 c_0^2 \sigma(S) (\det D)^{-(\gamma+1)}$

## Уравнение состояния в каноническом виде

Рассмотрим уравнение состояния вида (используемой сейчас в расчетах):

$$\rho_0 E(\tilde{D}) = \underbrace{\frac{\rho_0 c_0^2 \sigma(S)}{\gamma(\gamma-1)} (\det \tilde{D})^{-(\gamma-1)} + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma} \det \tilde{D}}_{F_1(\det \tilde{D})} + \rho_0 c_1^2 \left[ \text{tr}(\tilde{D} \tilde{D}^T) - \frac{1}{3} \left( \text{tr} \sqrt{\tilde{D} \tilde{D}^T} \right)^2 \right]$$

Условие положительной определенности квадратичной формы имеет вид:

$$\max_i \left( \frac{1 - \frac{2c_1^2 \gamma}{c_0^2 k_i}}{(k_1 k_2 k_3)^{-\gamma}} \right) < \sigma(S) < \min_i \left( \frac{1 + \frac{2c_1^2 \gamma}{3c_0^2 k_i} \left[ 1 - \frac{2k_i}{k_j + k_l} \right]}{(k_1 k_2 k_3)^{-\gamma}} \right)$$

## Уравнение состояния в каноническом виде

Рассмотрим другое уравнение состояния :

$$\rho_0 E(\tilde{D}) = \underbrace{\frac{\rho_0 c_0^2 \sigma(S)}{\gamma(\gamma-1)} (\det \tilde{D})^{-(\gamma-1)}}_{F_2(\det \tilde{D})} + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma} \frac{\text{tr} \sqrt{\tilde{D} \tilde{D}^T}}{3} + \rho_0 c_1^2 \left[ \text{tr}(\tilde{D} \tilde{D}^T) - \frac{1}{3} \left( \text{tr} \sqrt{\tilde{D} \tilde{D}^T} \right)^2 \right]$$

Условие положительной определенности квадратичной формы имеет вид:

$$0 < \sigma(S) < \min_i \left( \frac{\frac{2}{3k_i(k_j + k_l)} + \frac{2c_1^2 \gamma}{3c_0^2 k_i} \left[ 1 - \frac{2k_i}{k_j + k_l} \right]}{(k_1 k_2 k_3)^{-\gamma}} \right)$$

**В изотропной среде:**  $D_j^i = C_k^i B_j^k$   $V = \det(D)$  - удельный объём

$\sqrt{DD^T} - \frac{1}{3} \text{tr}(\sqrt{DD^T}) I$  - девиатор деформации (3x3 матрица с нулевым следом)

$D \rightarrow \Omega D \Omega^T$ ,  $\Omega \Omega^T = I$  (вращение системы координат)

$$\begin{aligned} \sqrt{DD^T} - \frac{1}{3} \text{tr}(\sqrt{DD^T}) I = & A_{-2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + A_{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} + \\ & A_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} + A_1 \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} -1/\sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & -1/\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$(A_{-2}, A_{-1}, A_0, A_1, A_2)^T$  - вектор, преобразующийся при вращениях  $\Omega$  по **представлению веса 2**

$$\text{tr} \left[ \sqrt{DD^T} - \frac{1}{3} \text{tr}(\sqrt{DD^T}) I \right]^2 = A_{-2}^2 + A_{-1}^2 + A_0^2 + A_1^2 + A_2^2$$

Уравнение состояния для среды, в которой существуют выделенные направления  
(например для кристаллов)

$$E = E \left( \det D, \sum_{j=-2}^2 A_j^2, \sum_{j=-2}^2 a_j G_{2[2,0]}^{j[k,0]} A_k, \sum_{j=-2}^2 b_j G_{2[2,2]}^{j[k,l]} A_k A_l, \sum_{j=-4}^4 d_j G_{4[2,2]}^{j[k,l]} A_k A_l, S \right)$$

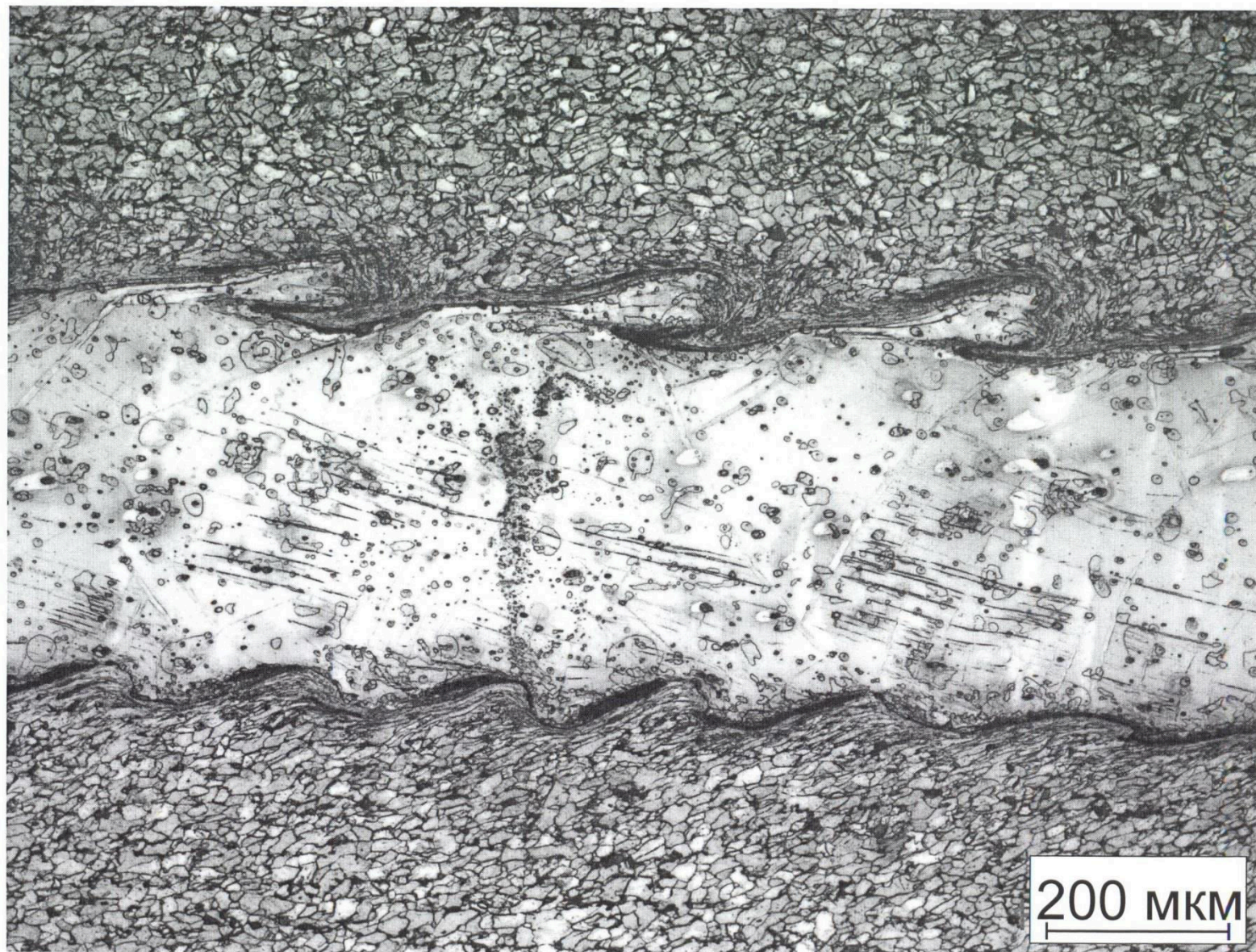
С.В. Селивановой указаны такие значения ненулевых коэффициентов  $a_j, b_j, d_j$  при которых в такой форме описываются кристаллы семи классических сингоний.

**Вопрос: каковы условия выпуклости для таких уравнений состояния?**

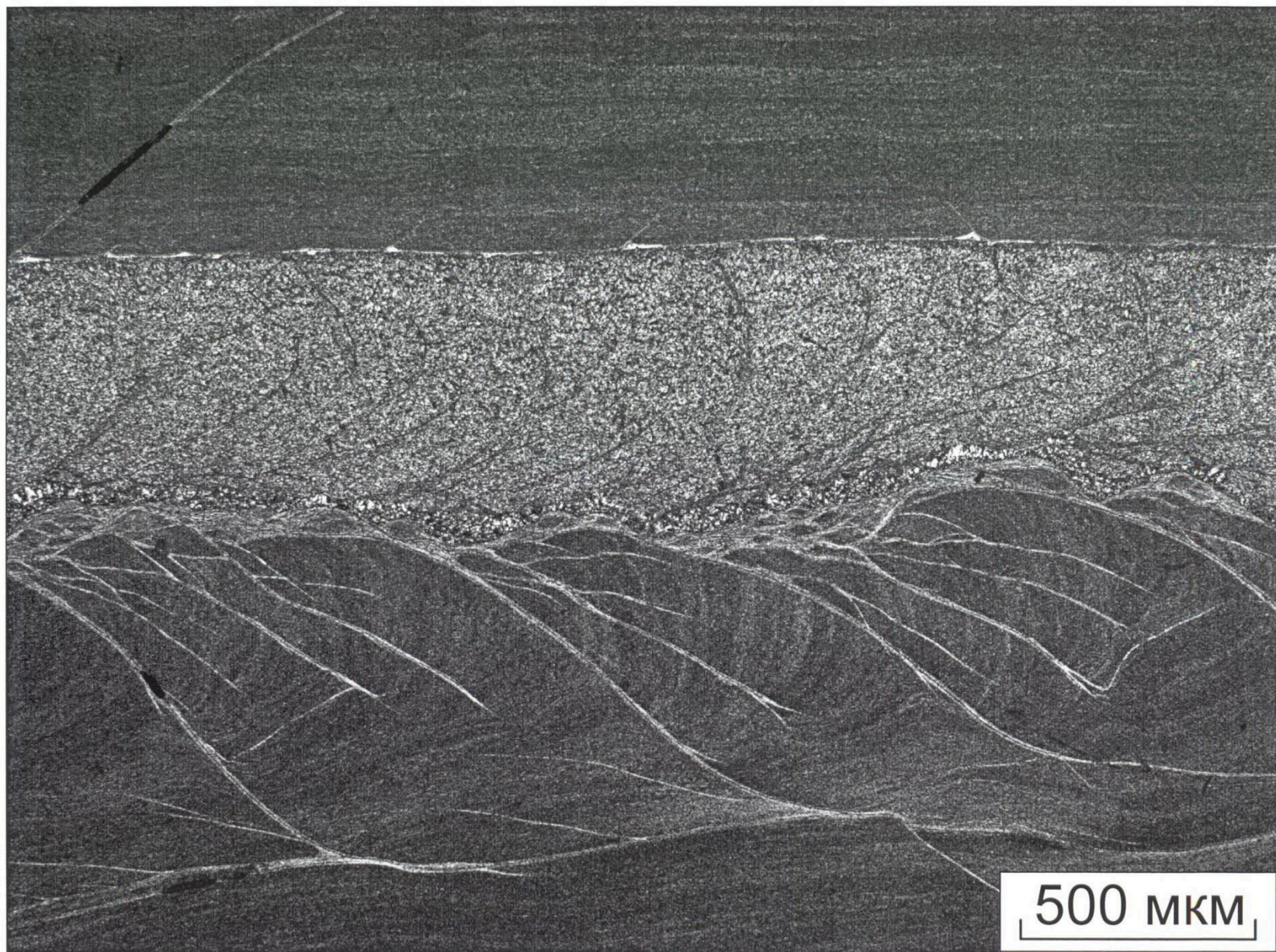
Далее приводятся фотографии отшлифованных срезов пластин после взрывной сварки (при большом увеличении).

*Образцы Институт Гидродинамики СО РАН  
Фотографии НГТУ*

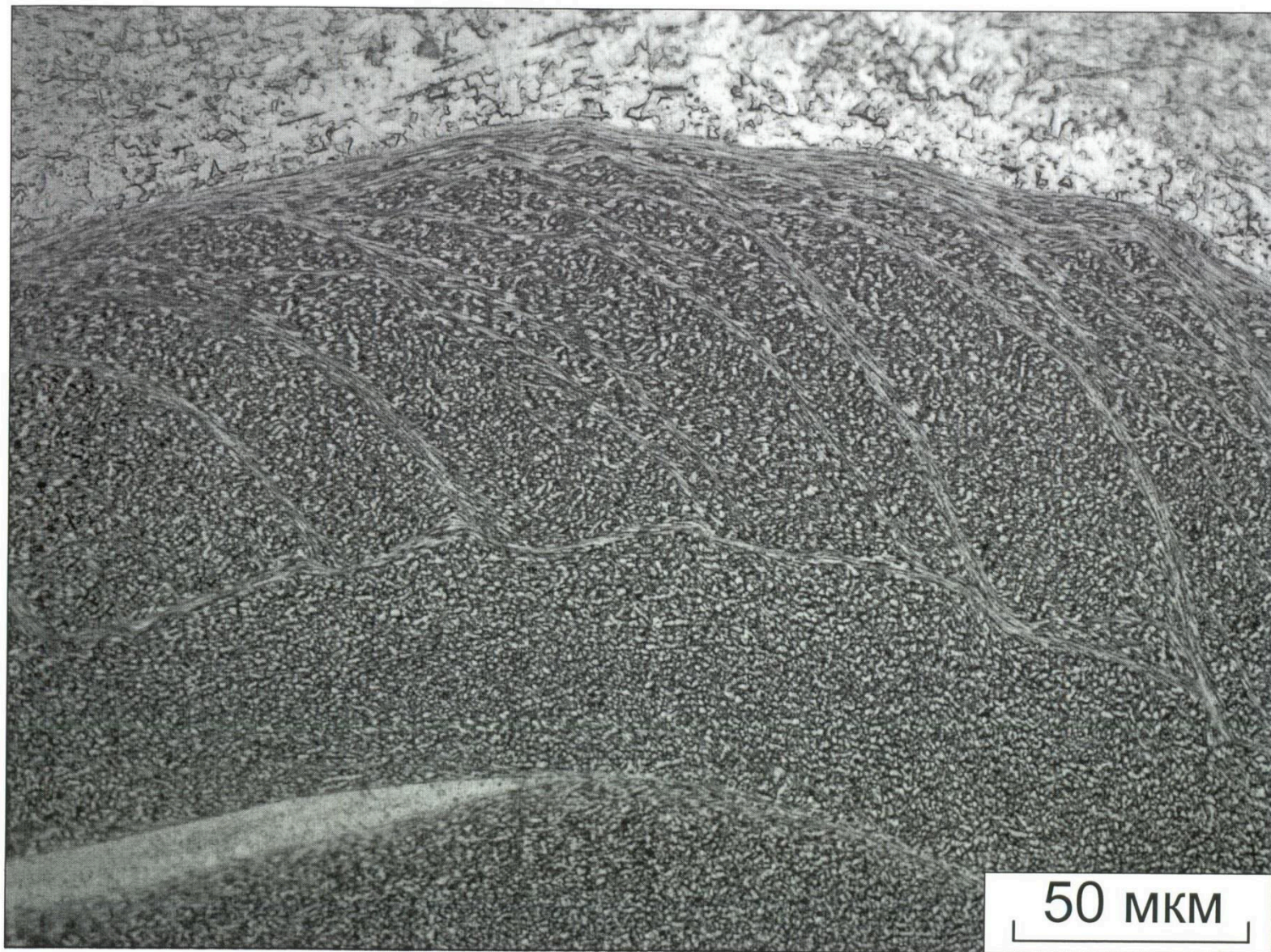




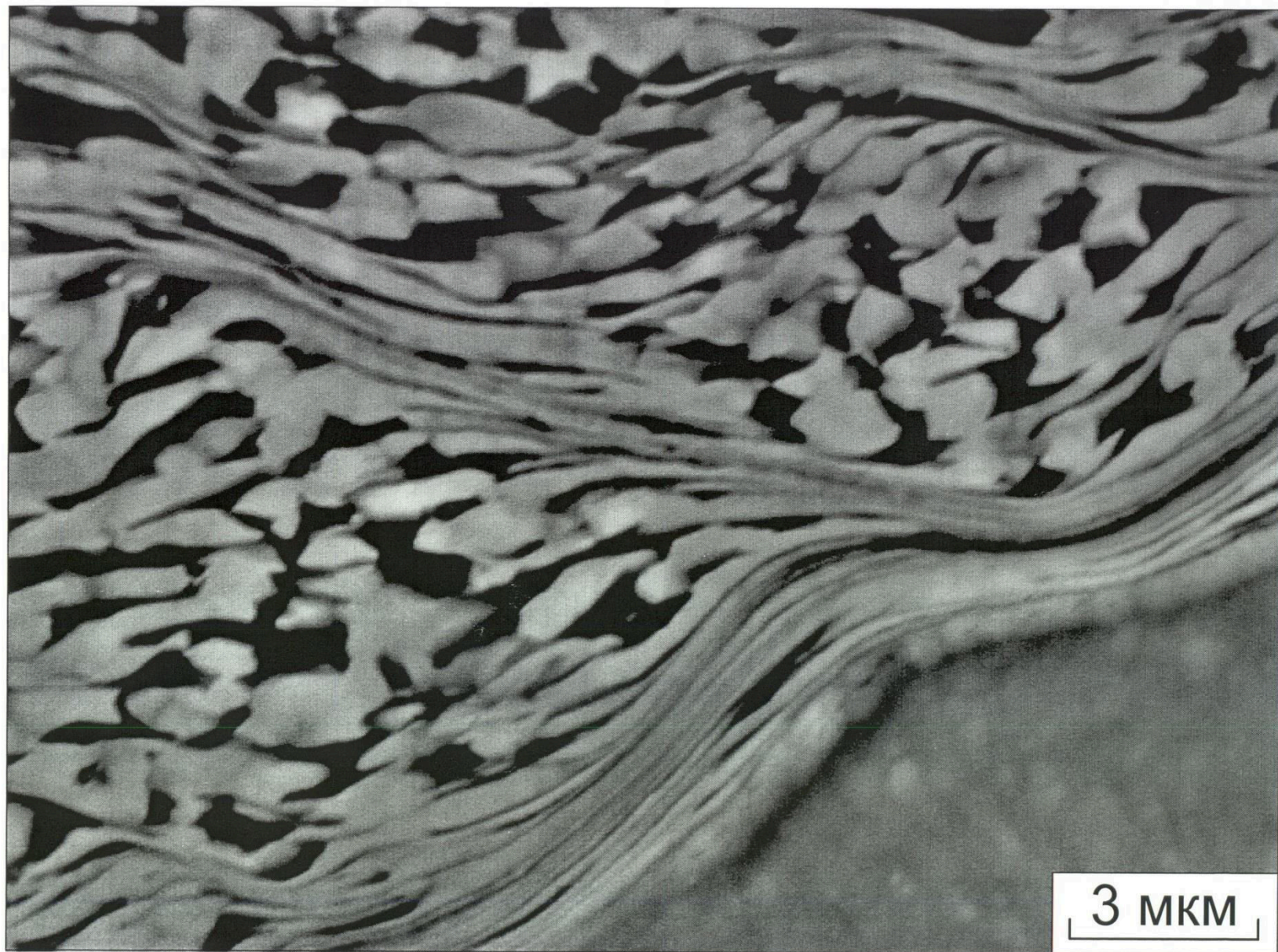






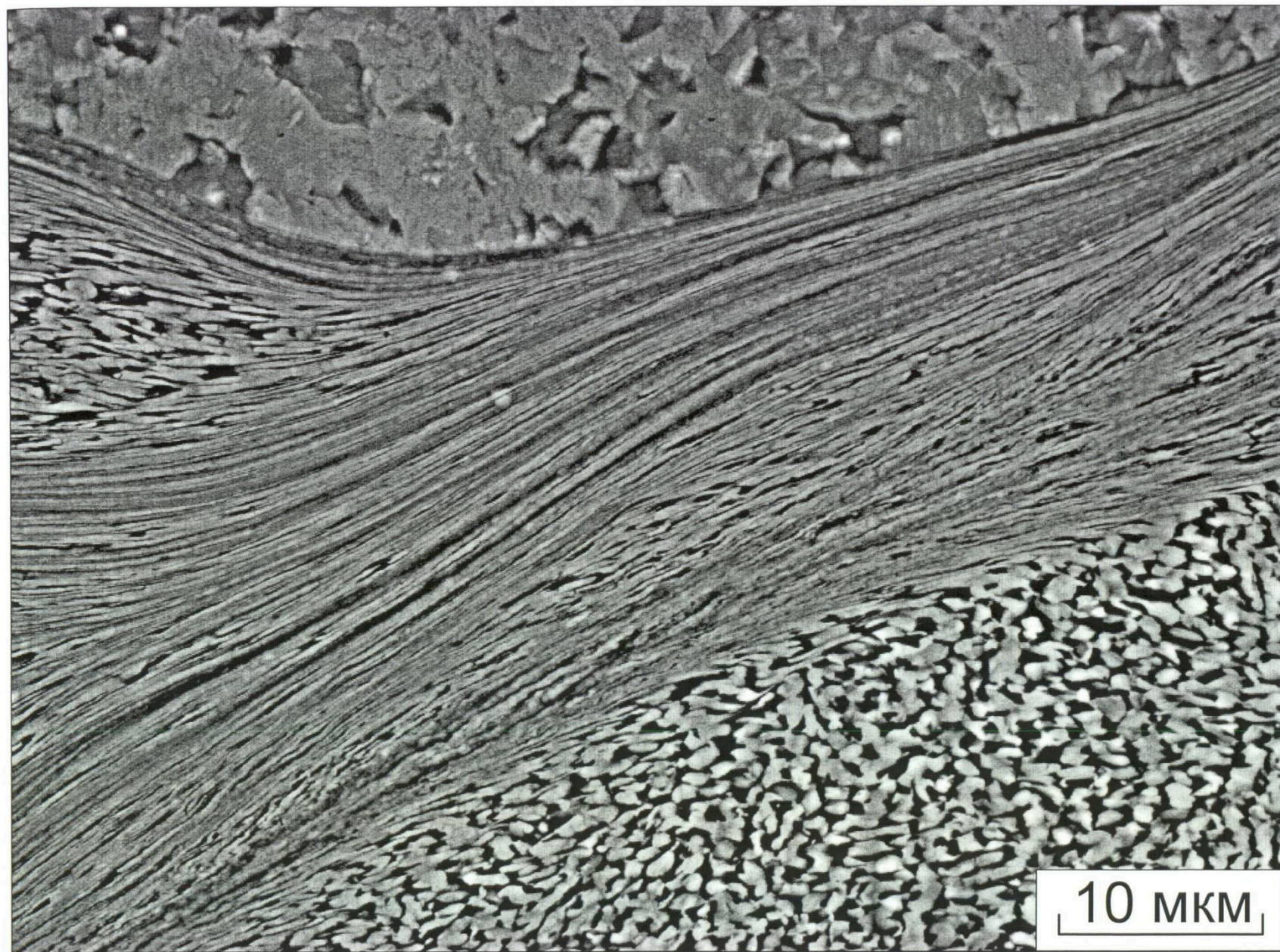




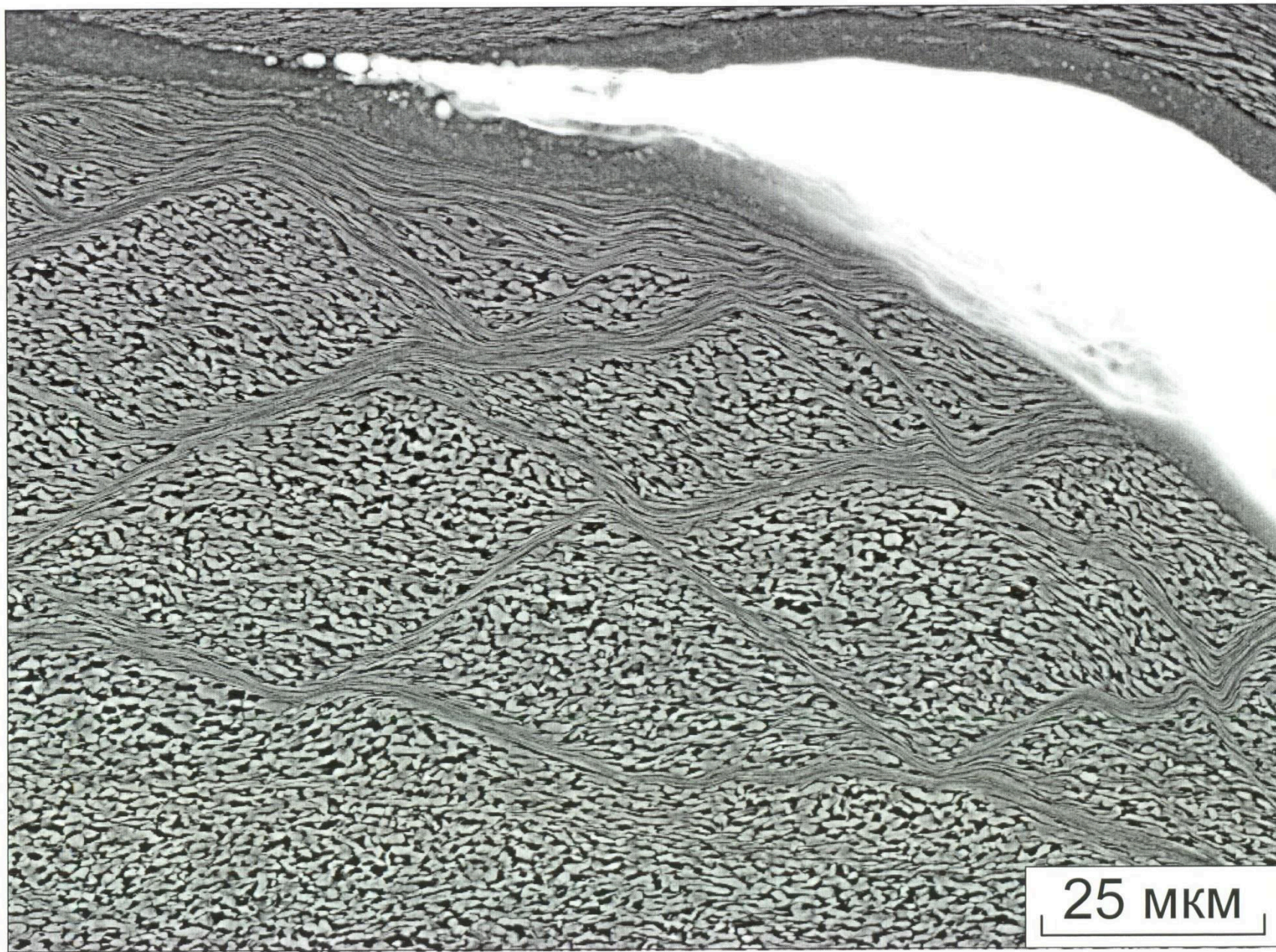


3 MKM









25 MKM



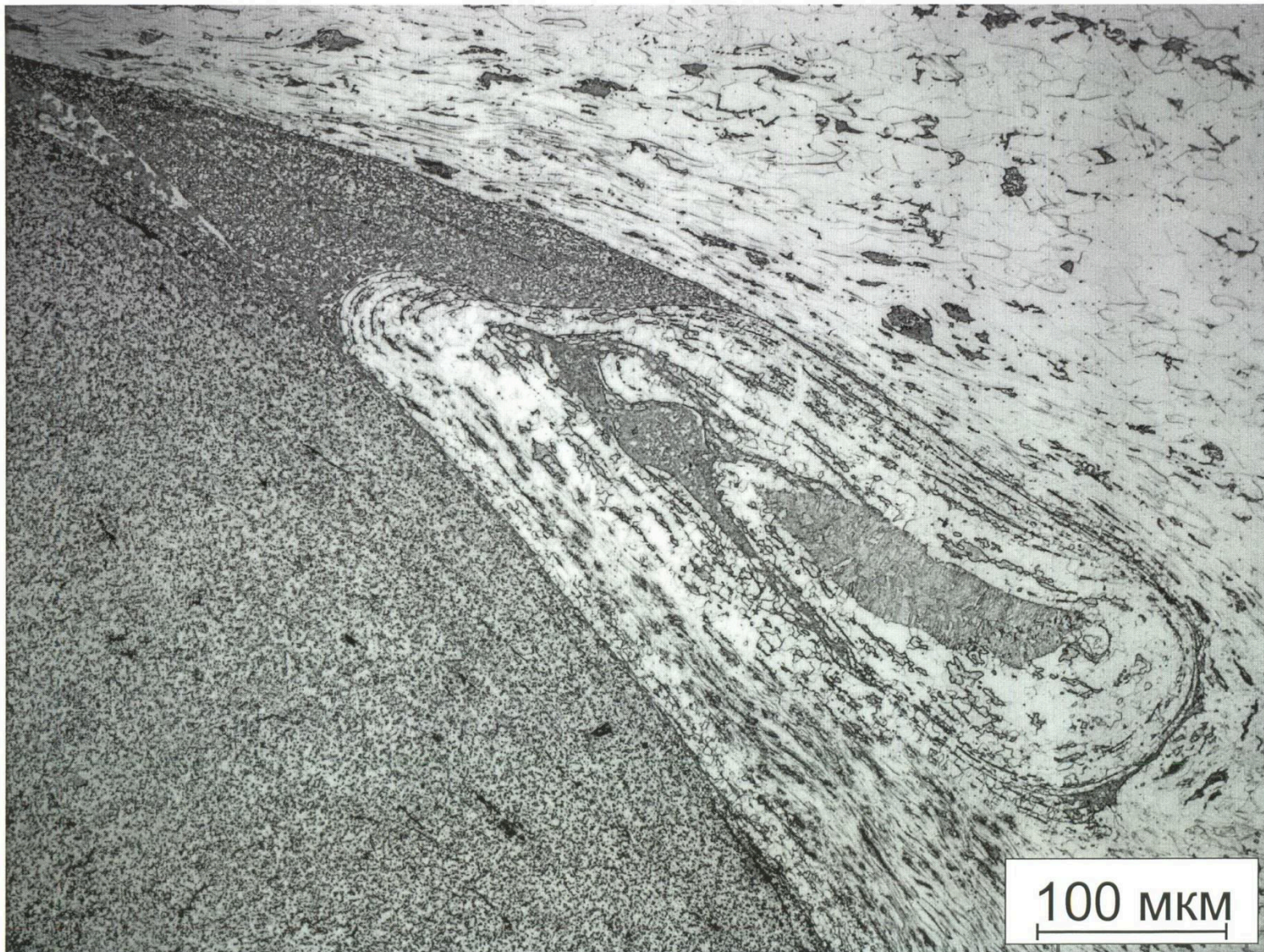


Рис. 4.13. Вихри, образующиеся в процессе сварки взрывом стали 20 и стали 60Г.

**Спасибо за внимание!**