

На правах рукописи



ИГОЛКИН Сергей Игоревич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОДВОДНОГО ВЗРЫВА
МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2014

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Мелькер Александр Иосифович

Официальные оппоненты: член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой прикладной кибернетики,
декан математико-механического факультета
Санкт-Петербургского государственного университета
Леонов Геннадий Алексеевич

доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой физики,
декан факультета фундаментальной подготовки
Санкт-Петербургского государственного университета
телекоммуникаций им. проф. М.А.Бонч-Бруевича
Колгатин Сергей Николаевич

Ведущая организация: НПО «Специальных материалов»,
г. Санкт-Петербург

Защита состоится «8» октября 2014 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.13 при ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет», расположенном по адресу: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29, I уч. корп., ауд. 41.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 29. Автореферат диссертации доступен на официальном сайте СПбПУ (<http://www.spbstu.ru/>).

Автореферат разослан «___» _____ 2014 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор технических наук, профессор



Григорьев Борис Семёнович

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Современную науку сейчас уже сложно представить без компьютерного моделирования, которое используется наряду с традиционными экспериментальными и теоретическими исследованиями. С его помощью могут быть даны ответы на вопросы, которые относятся к процессам, развивающимся в условиях, где не представляется возможным провести реальный эксперимент. Именно при решении сложных задач главной является степень применимости того или иного численного метода, вычислительного алгоритма, т. е. значение того, насколько точно они описывают изучаемую систему с учетом аппроксимации исходных уравнений, неточностей задания начального состояния и ошибок округления. К решению сложных, нетривиальных, задач проявляют интерес исследователи по всему миру, ставя перед собой цели по изучению самых разных проблем, применимости различных вычислительных методов и подходов к решению таких систем.

Одним из таких сложных процессов является подводный взрыв. Интерес к его исследованию изначально был вызван необходимостью решения широкого спектра технических задач, возникших в годы Второй мировой войны. Внимание, уделяемое данной проблеме в тот период времени, привело к интенсивному развитию представлений о характере взрывных движений. Было отмечено, что работа над проблемой механики взрыва послужила толчком к значительному прогрессу в смежных разделах прикладной математики и механики сплошных сред.

Учеными проводились исследования подводного взрыва, взрыва в грунтах; изучалось поведение металлов под действием продуктов детонации взрывчатых веществ; эти продукты создают для среды экстремальные условия в виде высоких давлений (в сотни кбар) и температур (достигают нескольких тысяч градусов). Установлено, что при таких условиях многие твердые тела «забывают» о своих прочностных свойствах, жесткой кристаллической структуре и ведут себя по законам гидродинамики. В работах по данной тематике рассматриваются теоретические и экспериментальные методы исследования подводного взрыва, при этом задачи о поведении различных сред при взрывном нагружении, в основном, описывают в рамках существующих математических моделей. В исследованиях подводного взрыва условно выделяют три основных блока проблем:

- Ударные волны, уравнения состояния и динамика полости с продуктами детонации (при этом предполагается, что рассматриваемая среда безгранична);
- Поведение среды со свободными границами при взрывном нагружении, микронеоднородности в жидкости и растягивающие напряжения;

- Течение жидкости с неизвестными свободными границами, высокоскоростные струйные течения при малозаглубленных подводных взрывах;

Все перечисленные выше направления связаны, прежде всего, с пониманием физики рассматриваемых явлений, поиском управляющих механизмов, разработкой экспериментальных методов исследования и созданием математических моделей, которые могли бы адекватно описывать эти высокоскоростные процессы. В.К. Кедринский в своей монографии («Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели», 2000 г.) также отмечал, что “жидкость при взрывных нагрузках – все еще загадочная стихия” и ее часто сложно описать, просто выписав полную систему законов сохранения в виде дифференциальных уравнений и замыкающих ее различного рода определяющих соотношений. В данной работе представлена реализация моделирования явления подводного взрыва, путем создания для его расчета пакета уникальных вычислительных программ, в основе которых лежит метод молекулярной динамики. При этом важно отметить ряд неоспоримых преимуществ в пользу проведения численного эксперимента:

- Во время проведения численного моделирования (эксперимента) на каждом этапе есть возможность увидеть, что происходит в исследуемой системе в любой момент времени, а так же динамически корректировать и изменять те или иные параметры системы;
- Численное моделирование позволяет для рассматриваемой системы производить исследование во всем диапазоне параметров. При проведении реального эксперимента это практически неосуществимо;
- Численное моделирование требует лишь только наличия компьютера, с установленными компиляторами и нужными библиотеками, поэтому оно гораздо дешевле проведения реального эксперимента. Единственным ограничивающим фактором является лишь только время расчета;

Метод, примененный в данной работе, является одним из современных подходов при компьютерном моделировании процессов в физике, химии, биологии, биохимии, биофизике. Основные идеи метода молекулярной динамики были впервые сформулированы в 1957 году Олдером и Вейнрайтом для твердых сфер и затем несколько лет спустя данный метод был рассмотрен ими уже более подробно. Под твердыми сферами при этом понимались изначально молекулы, нежели атомы. Затем Гибсоном, а также Рахманом это было проделано для систем атомов с непрерывными потенциалами межатомного взаимодействия Леннард-Джонса, Дебая и Борна-Майера. Так было положено начало изучению различных физических систем при помощи данного метода. В основе метода лежит один из основных законов физики: система моделируется набором из N

частиц с заданным законом взаимодействия (парные и многочастичные потенциалы), затем на каждом шаге моделирования численно интегрируется система уравнений движения. Результатом решения данной задачи являются значения координат и скоростей частиц в каждый момент времени. Далее, исходя из полученных значений, проводится расчет основных кинетических параметров системы: температуры, энергии, давления, коэффициентов переноса, корреляционных функций.

Ввиду продолжительной истории использования метода молекулярной динамики не раз было отмечено, что результаты, полученные с его помощью, хорошо согласуются с экспериментальными данными и аналитическими подходами в тех случаях, где такое сопоставление представляется возможным провести. Даже несмотря на огромную разницу в масштабах схожих явлений, данный метод обладает определенной прогностической силой. При этом известно, что классические динамические системы многих частиц принадлежат к системам с сильной локальной неустойчивостью. Исходя из этого, исследование свойств и фазовых траекторий системы многих частиц, используемых в методе молекулярной динамики, в зависимости от различных факторов (начальные, граничные условия) так же является немаловажной задачей. Так же очевидно, что при проведении численного моделирования мы получаем результат с некоторой точностью, и она связана с накоплением численных погрешностей. Эти факты до сих пор вызывают у некоторых скептиков вопрос о том, насколько результаты молекулярно-динамического моделирования адекватны реальному эксперименту, и как известно, не существует другого способа проверить это, кроме как непосредственно провести вычислительный эксперимент и дополнить базу знаний по этому вопросу.

По результатам исследований ряда проблем, возникающих при подводном взрыве, а так же образованию и распространению вследствие данного явления волн, следует отметить монографию 2000 года В.К. Кедринского и книгу 1995 года Б. Мехауте, как наиболее обстоятельные. В данных трудах рассматриваются созданные канонические теории и математические модели, которые могут представлять интерес для обширного круга исследователей, поскольку возникновение мощных подводных взрывов в непосредственной близости от побережий, морских баз, заливов может иметь серьезные последствия, а изучение волн, порожденных подводным взрывом, может оказаться полезным для понимания естественных явлений, имеющих место в океане. Также в последнее время встречаются статьи, в которых предлагается использовать технику нановзрывов в медицине для направленной доставки химических веществ в клетку.

Одной из основных задач данной работы было создать программную реализацию моделирования подводного взрыва в определенном приближении, которая

могла бы стать базовой площадкой к созданию и реализации более сложной физической системы, в которой был бы реализован весь потенциал метода молекулярной динамики. Важной целью являлось определение применимости данного метода к такому классу задач. При этом важно отметить полное отсутствие работ по данному направлению с использованием метода молекулярной динамики.

Целью данной работы является моделирование и исследование подводного взрыва методом молекулярной динамики. Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать пакет программ для расчета подводного взрыва методом молекулярной динамики.
2. Разработать и применить модель и алгоритм расчета взрывчатого вещества в рамках метода молекулярной динамики.
3. Исследовать возможности ускорения молекулярно - динамических расчетов за счет применения современных вычислительных средств и алгоритмов.
4. Исследовать динамику подводных возмущений системы многих взаимодействующих частиц.
5. Изучить распространение ударной волны, возникающей при подводном взрыве.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Пакет программ для моделирования подводного взрыва.
2. Алгоритм, позволяющий моделировать взрывчатое вещество.
3. Специально разработанная техника расчета радиальной плотности ударной волны для анализа ее структуры.
4. Данные моделирования подводного взрыва, полученные методом молекулярной динамики.
5. Данные о динамике распространения ударной волны.
6. Анализ распада ударной волны на основе уравнения Кортевега-де Вриза – Бюргерса.

Научная новизна: Предложены и реализованы алгоритмы моделирования подводного взрыва методом молекулярной динамики и изучения динамики ударной волны. Автором впервые:

1. Выполнено оригинальное исследование процессов, возникающих при подводном взрыве методом молекулярной динамики.

2. Продемонстрированы визуальные картины моделирования подводного взрыва, полученные методом молекулярной динамики.
3. Разработана программа для моделирования подводного взрыва методом молекулярной динамики.
4. Разработан и реализован алгоритм, позволяющий моделировать взрывчатое вещество и не требующий задания его точной структуры.
5. Разработана и применена специальная техника, позволяющая проводить анализ динамики ударной волны при подводном взрыве.
6. Построены и проанализированы зависимости распространения радиальной плотности ударной волны в разные моменты времени, демонстрирующие ее асимметричность.
7. Проанализирован распад ударной волны на основе уравнения Кортевега-де Вриза – Бюргерса.

Практическая значимость диссертационной работы определяется тем, что компьютерное моделирование данного процесса позволяет для рассматриваемой системы проводить исследование в различных диапазонах параметров. При проведении реального эксперимента это практически неосуществимо. Немаловажным является также исследование применимости метода молекулярной динамики к такому классу задач, в котором есть свободная поверхность раздела двух сред, в качестве естественной альтернативы методам вычислительной гидродинамики и прямому методу Монте-Карло.

Созданная, в результате выполнения данной работы, программа позволяет на начальном этапе реализации задавать различные варианты исследуемой области, изменять форму, мощность и расположение заряда, с целью изучения динамики данного процесса в заданных условиях, а впоследствии и выяснения характера возмущений на поверхности воды, а также наблюдения за распространением ударной волны. Данная программа служит базовой площадкой, при помощи которой возможно создание и реализация более сложной физической системы для анализа различных ситуаций, связанных с взрывными процессами.

Достоверность изложенных в работе результатов контролировалась путем сравнения с имеющимися экспериментальными данными и результатами расчета динамического процесса, который развивается после подводного взрыва. Расчеты показывают поразительное сходство с известной эволюцией системы, а именно: распространение фронта ударной волны, формирование кратера, распад ударной волны при достижении границ свободной поверхности с последующим подъемом слоя воды над областью взрыва.

Апробация работы. Работа отмечена грантом правительства Санкт-Петербурга для студентов вузов, аспирантов и молодых ученых в 2011 году. Основные результаты работы докладывались на следующих конференциях: Конференция «XXXVIII Неделя науки СПбГПУ» (Санкт-Петербург, 2009), Конференция «XXXIX Неделя науки СПбГПУ» (Санкт-Петербург, 2010), Международная конференция «Junior Scientific Conference 2010» (Вена, Австрия, 2010), Международная конференция «14th International Workshop on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations (NDTCS-2011)» (Эспоо, Финляндия, 2011), Международная конференция «15th International Workshop on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations (NDTCS-2013)» (Минск, Белоруссия, 2013)

Личный вклад. При участии автора диссертационной работы были сформулированы и поставлены цели и задачи исследования. Автор лично разрабатывал комплекс программ для моделирования подводного взрыва, в которых были реализованы все представленные в диссертации алгоритмы, методы, а также применены оригинальные методики. При участии автора был проведен анализ полученных данных, приведено математическое описание явлений, наблюдаемых в результате проведенного численного эксперимента. Одним из определяющих также является вклад автора в создание научных работ, опубликованных по теме диссертации.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 10 печатных изданиях, 5 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 5 — в тезисах докладов.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, перечня основных результатов и выводов. Полный объем диссертации 113 страниц текста с 55 рисунками и 7 таблицами. Список литературы содержит 115 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы. Приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, а также указывается научная новизна и практическая значимость представляемой работы. Дается краткий обзор структуры разделов диссертации.

Первая глава Первая глава носит обзорный характер и призвана представить общие сведения об исследуемом процессе, рассмотреть уже проведенные ранее экспериментальные и теоретические работы. Рассмотрены явления волн и ударные волны, происходящие при подводном взрыве. Кроме того, в данной

главе приводятся выводы уравнения КдВ для плоских волн, характеризующего нелинейный характер их распространения. В данной главе отмечается математическая постановка задачи о сильном взрыве, и приводится вывод формул, характеризующих закон затухания ударной волны, зависящий от формы заряда. Делается вывод о применимости метода молекулярной динамики к такому классу задач, в сравнении с другими подходами к их решению.

Вторая глава посвящена рассмотрению методики компьютерного моделирования. Дается определение изучаемой системе, которая представляет собой жидкость Леннард-Джонса в двумерном пространстве с периодическими или жесткими границами в продольном направлении и стенкой на нижней границе. На частицы жидкости действует внешнее гравитационное поле F_i^G в направлении, перпендикулярном поверхности жидкости. Уравнение движения жидкости имеет вид (1)

$$m_i \ddot{x}_i = F_i + F_i^G, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

Параметры, использованные в потенциале Леннард-Джонса, соответствуют таковым для молекулы воды: ($\sigma = 0.317 \text{ nm}$, $\varepsilon = 0.6502 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$). Отмечается, что предыдущие компьютерные эксперименты, проведенные с водой показали, что структура ее молекулы сложнее, чем предполагалось ранее. Было найдено, что для правильного описания такого объекта необходимо использовать теорию рядов связей, где в дополнение к межатомному взаимодействию следует учитывать электрическое взаимодействие между зарядами ковалентных связей. Поскольку такой глобальный подход ведет к большим трудностям вычислительного плана и к усложнению модели, было решено использовать более простую модель воды, заменив молекулу одной частицей. Взаимодействие таких частиц описывалось с помощью потенциала Леннард-Джонса.

Так как проблема моделирования взрывчатого вещества представляет собой отдельную задачу, а при исследовании плоских ударных волн в воде взрывчатку можно исключить. Вместо компьютерного моделирования на атомарном уровне сложная модель молекулы взрывчатки заменялась одной частицей. В данной работе в круговую область заданного размера (с определенными координатами) помещалось известное количество частиц, подвергнутых равномерному сжатию. Вследствие изменения расстояния между частицами данная структура накапливает большое количество упругой энергии (Рис. 1). В результате декомпрессии данной области частицы, моделирующие взрывчатку, приобретали огромную скорость и, как следствие этого, высокую температуру. Таким образом осуществлялось моделирование взрыва. Данная методика нашла отражение в работах [1–6]. В начале данной главы дается подробное описание расчетной области и начального расположения частиц, а также используемых граничных условий. Далее отмечается, что для наблюдения за динамикой зарождения и

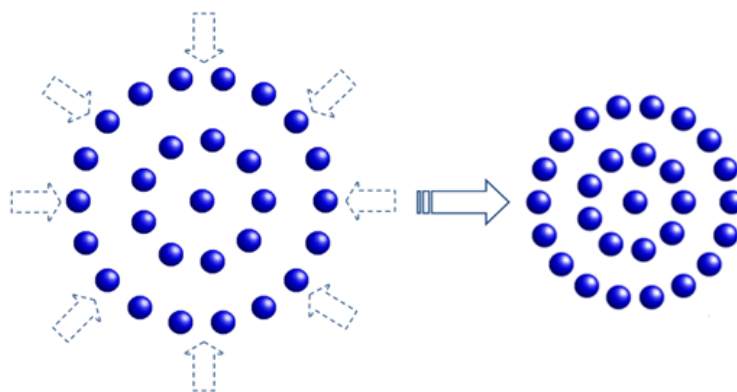


Рис. 1: Моделирование взрывчатки: ее сложные молекулы заменяются частицами в виде шариков; пунктирными стрелками показано воздействие сил всестороннего сжатия; сплошной стрелкой обозначен переход системы в новое состояние с высвобождением большой энергии.

распространения ударной волны была разработана и применена специальная методика. Идея заключается в том, чтобы через определенные моменты времени рассчитывать радиально распределенную плотность частиц вдоль линии направления движения ударной волны в заранее определенной области пространства по нескольким значимым направлениям. Таким образом в выходном файле оказываются данные зависимости распределения данной плотности с течением времени. После построения графиков на основе этих зависимостей возможен дальнейший анализ динамики данного процесса, определения скорости движения ударной волны, ее интенсивности и затухания, зависящих от формы и мощности моделируемого заряда. На Рис. 2 схематично представлено разбиение расчетной области на 3 сектора по 30 градусов в диапазоне от 0° до 90° . В расчетную область,

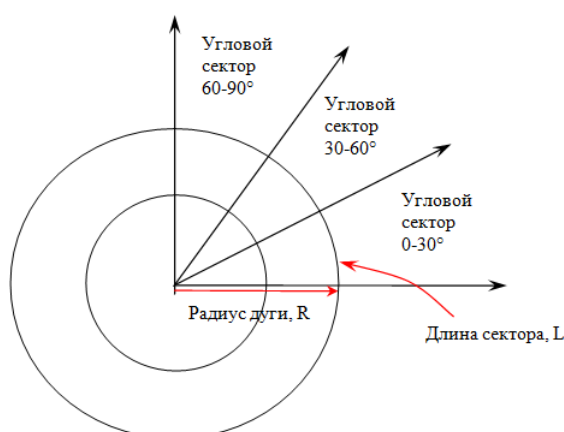


Рис. 2: Схематическое изображение разбиения области распространения ударной волны.

в центр заряда помещается начало системы координат. Сектор данной системы координат, соответствующий положительным направлениям координатных осей, также дополнительно разбивается на три подсектора по 30 градусов каждый. В

радиальном направлении задается шаг Δh_r , отвечающий за вторую составляющую разбиения области. В итоге мы имеем систему подсекторов окружностей, в каждом из которых, через заранее определенный шаг по времени будет производиться расчет радиальной плотности частиц по следующей формуле:

$$\rho_{rad}(t) = \frac{N_{sect}(t)}{L_{sect}} = \frac{6N_{sect}(t)}{\pi R_{sec}}, \quad (2)$$

где ρ_{rad} – радиальная плотность распределения частиц, L_{sect} – длина сектора, N_{sect} – число частиц в подсекторе, R_{sec} – радиус окружности, частью которой является рассматриваемый сектор. Зависимость радиальной плотности распределения частиц от расстояния от центра взрыва являются наглядным показателем, характеризующим динамику ударно-волнового процесса в рассматриваемой системе. В конце главы указывается поэтапный план выполнения работы, приводится блок-схема вычислительной программы и алгоритм реализации компьютерного моделирования.

В Третьей главе подробно изложены вычислительные аспекты численного моделирования. Приводится описание метода молекулярной динамики, являющегося одним из современных методов компьютерного моделирования, в котором для изучения поведения системы с течением времени используется классическая механика. Применение метода молекулярной динамики включает численное решение системы уравнений (3).

$$m_i \ddot{x}_i = F_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (3)$$

Интегрирование данной системы уравнений с помощью различных численных схем позволяет определить траектории движения атомов. Наиболее важные требования, налагаемые на такие схемы – это устойчивость, точность и высокая скорость работы. Сила, действующая на атом, определяется как отрицательная производная потенциальной энергии (4)

$$F_i = -\nabla_{x_i} U(x_1, \dots, x_N), \quad i = 1, \dots, N. \quad (4)$$

Если заданы начальные координаты и скорости частиц, то эволюция системы во времени зависит только от потенциала, который определяет взаимодействие между атомами. Потенциал Леннарда–Джонса (потенциал 6-12) – простая модель парного взаимодействия неполярных молекул, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Он выражается формулой (5).

$$U(r_{ij}) = 4 \cdot \varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) = 4 \cdot \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \cdot \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 - 1 \right), \quad (5)$$

здесь r_{ij} – расстояние между центрами частиц i и j , ε – глубина потенциальной ямы, σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Параметры σ и ε являются характеристиками вещества. Эта модель хорошо описывает взаимодействие сферических неполярных молекул и поэтому используется в расчетах, а также при компьютерном моделировании.

Для получения траекторий атомов в пространстве и времени существуют различные численные схемы решения системы классических уравнений движения: от простейших методов Эйлера первого порядка, до схем предиктор-корректор высоких порядков точности. В данной работе был использован метод Гира в представлении вектором Нордсика шестого порядка точности. К преимуществам данного метода относятся его надежность и высокий порядок точности при относительно умеренных, по сравнению с другими методами, временных шагах. В главе также отражены вопросы оптимизации вычислений без параллелизации алгоритма расчета. Они реализованы посредством метода связанных ячеек в случае убывающих потенциалов, которым как раз и является потенциал Леннард-Джонса, а также обезразмеривания переменных в определяющих уравнениях. В главе находит отражение задача задания поля начальных скоростей, для решения которой было использовано статистическое распределение Максвелла-Больцмана. В конце главы приведен параграф, посвященный вопросу о точности метода молекулярной динамики.

Четвертая глава непосредственно посвящена результатам моделирования подводного взрыва и исследованию динамики ударной волны. В качестве основных представительных результатов продемонстрированы визуальные картины моделирования. Они позволили судить о внешнем сходстве полученных данных с известными явлениями возникающими при подводном взрыве. Например, первый расчет моделирует взрыв на мелкой воде со стандартным, начальным распределением частиц в заряде, соответствующий таковому при тестовом расчете. Визуализация данного процесса представлена на Рис. 3 – 6. Момент времени $t' = 0$ отображает начало итерационного процесса с помещенным в моделируемую область зарядом, после установления состояния термодинамического равновесия при температуре $300^\circ K$. Спустя 4000 итерационных шагов при $t' = 1$ отчетливо проявляется контур расширения области, в которой произошел взрыв. Данное расширение наблюдается до момента достижения данной областью поверхностного слоя, что примерно соответствует моменту $t' = 2$.

После момента времени $t' = 2$ и до момента $t' = 10$ уже наблюдается непосредственный выброс поверхностного слоя частиц, выталкиваемых быстро расширяющейся областью. Их практически полное оседание достигается к моменту $t' = 22$. С моментом времени $t' = 10$ также связан процесс отхода первых базисных волн в обе стороны от эпицентра и образование кратера $t' = 2 - 10$. Далее

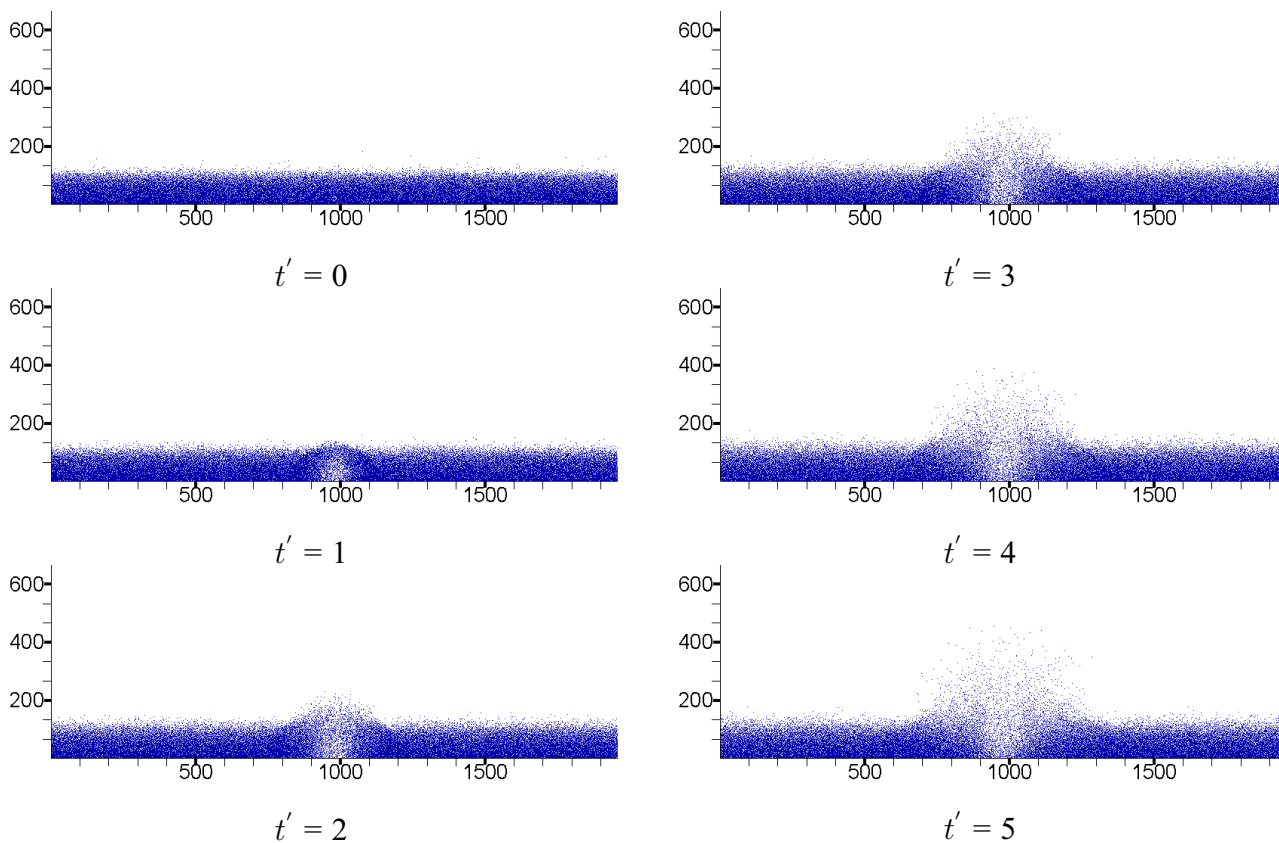


Рис. 3: Временная эволюция подводного взрыва $t' = 0 - 5$

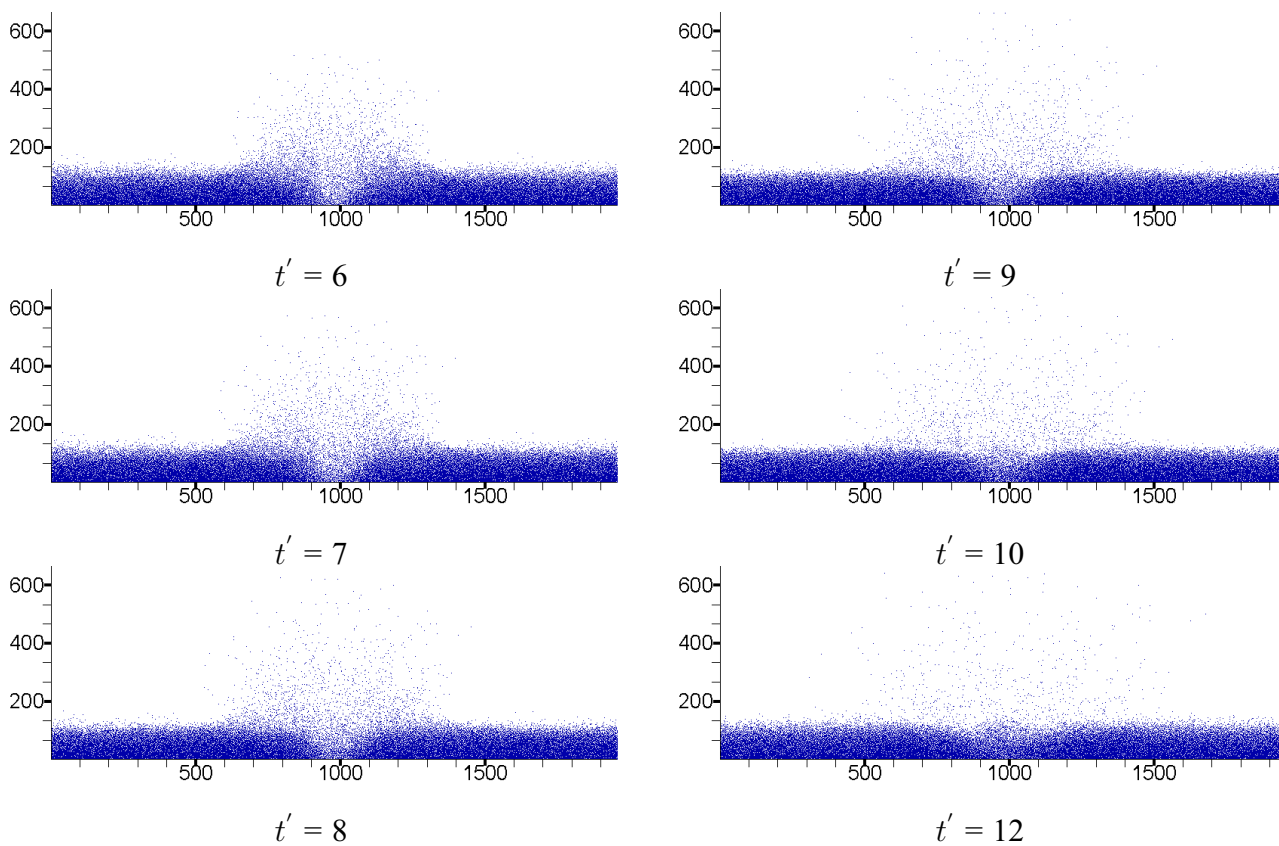


Рис. 4: Временная эволюция подводного взрыва $t' = 6 - 12$

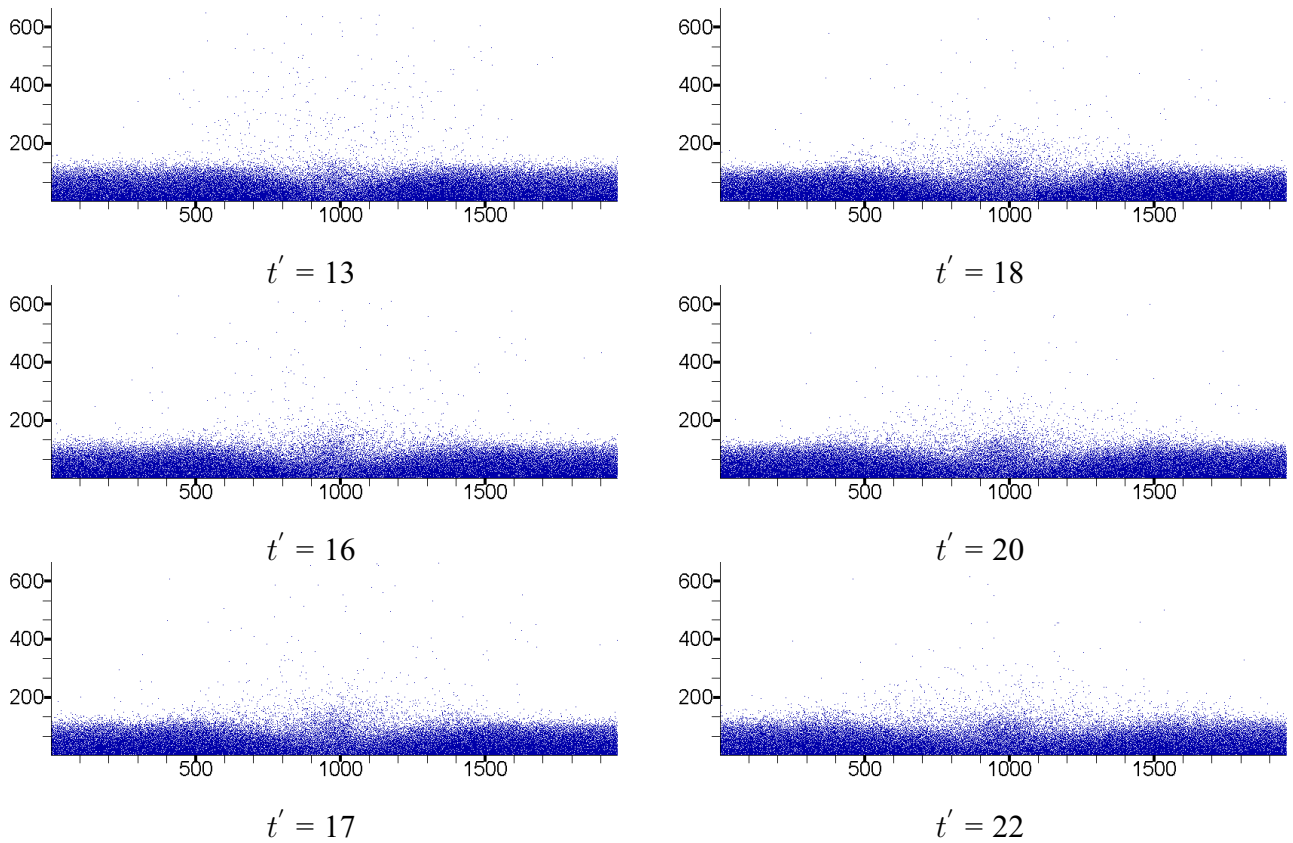


Рис. 5: Временная эволюция подводного взрыва $t' = 13 - 22$

происходит процесс схлопывания образованного взрывом кратера, следствием которого является всплеск частиц над областью взрыва, моменты $t' = 10 - 28$. В середине этого процесса при $t' = 16 - 17$ происходит сдвиг массы частиц среды в сторону, в продольном направлении с образованием более сильных волн, достигающие уже края расчетной области к моменту $t' = 34$. Используя разработанную в [5, 7–9] процедуру, можно вычислить радиальную плотность ударной волны. Рис. 7 – 9 показывают эволюцию ударной волны в различных секторах (направление против часовой стрелки), располагающихся в упорядоченной последовательности. Эти данные позволяют рассмотреть динамику распространения ударной волны в радиальной области с размером примерно равным толщине моделируемого слоя воды. Зависимости радиальной плотности ρ_{rad} от расстояния r в моменты $t' = 0 - 1.5$ представлены на Рис. 7 – для сектора $0^\circ - 30^\circ$, Рис. 8 – для сектора $30^\circ - 60^\circ$, Рис. 9 – для сектора $60^\circ - 90^\circ$. Полученные зависимости аппроксимированы полиномом 7-ой степени. По Рис. 7 – 9, исходя из максимального значения радиальной плотности ρ_{rad} , можно отчетливо проследить в каждый момент времени за движением и распространением ударной волны. Построенные профили показывают, что в секторе $0^\circ - 30^\circ$ максимальная плотность ударной волны, представленная в виде уединенной волны, слегка уменьшается с течением времени $t' = 0 - 1.5$, с $\rho_{rad} \approx 19 \text{ N/нм}$ до $\rho_{rad} \approx 16 \text{ N/нм}$, такой же эффект наблюдается и в остальных секторах. Также следует отметить тот факт,

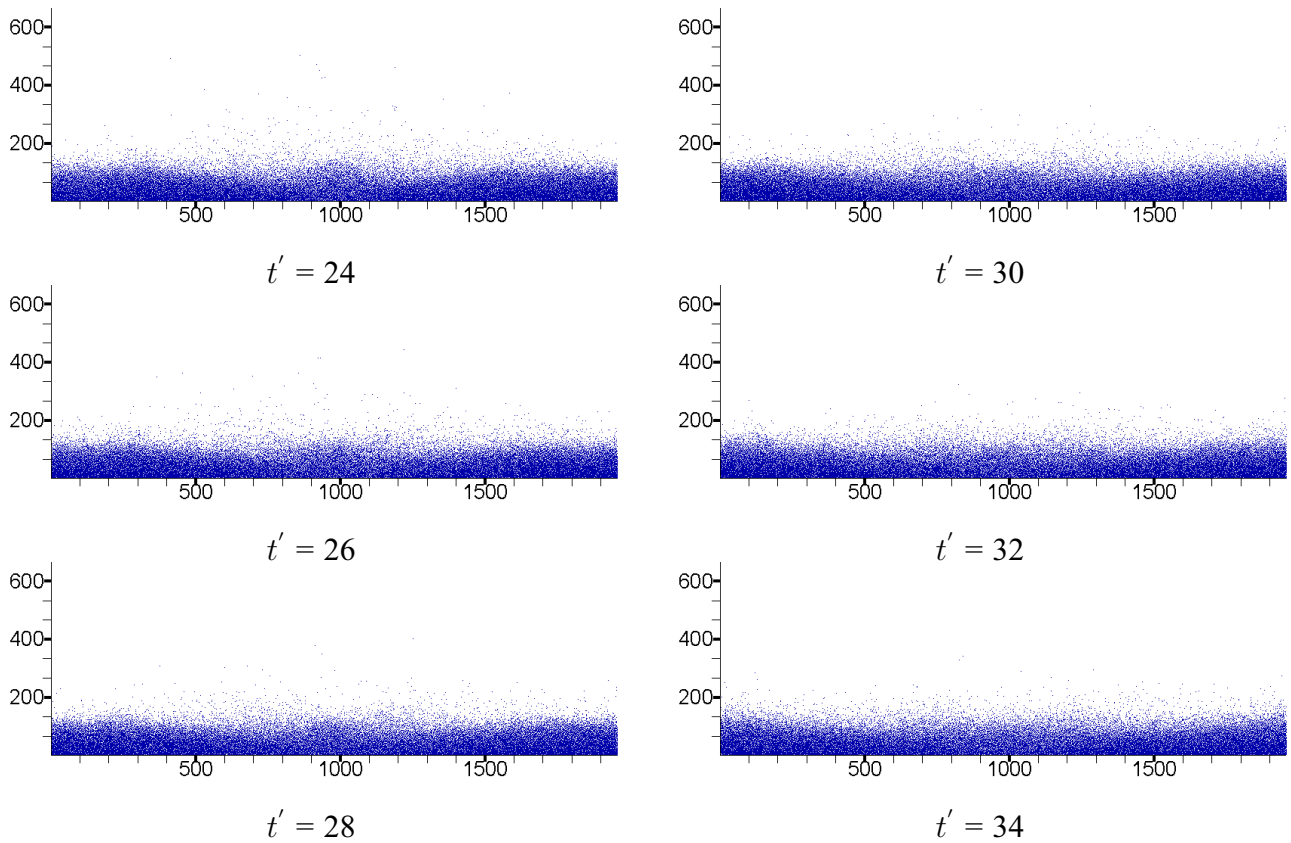


Рис. 6: Временная эволюция подводного взрыва $t' = 24 - 34$

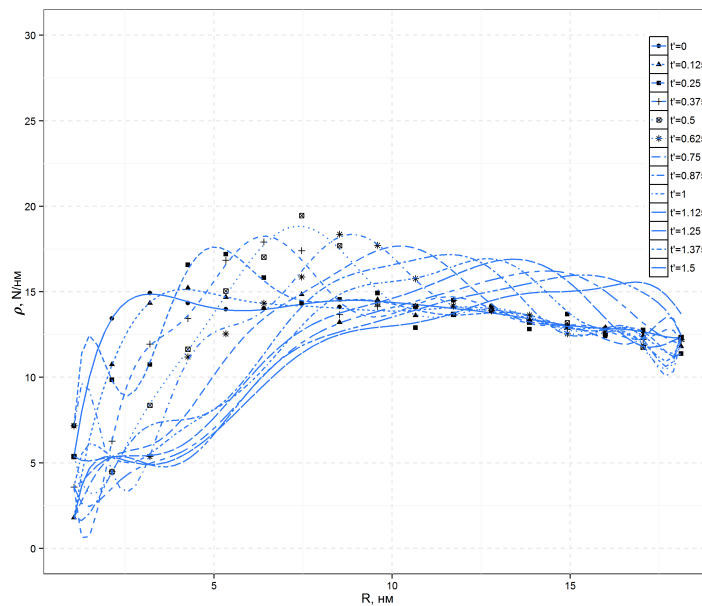


Рис. 7: Радиальная плотность ударной волны. Сектор $0^\circ - 30^\circ$.

Профиль распределения $t' = 0 - 1.5$

что при распространении волны высота профиля ударной волны уменьшается со временем, тогда как ширина профиля увеличивается. Форма ударной волны при этом становится асимметричной. Асимметрия возрастает со временем, проявляя волнообразный характер.

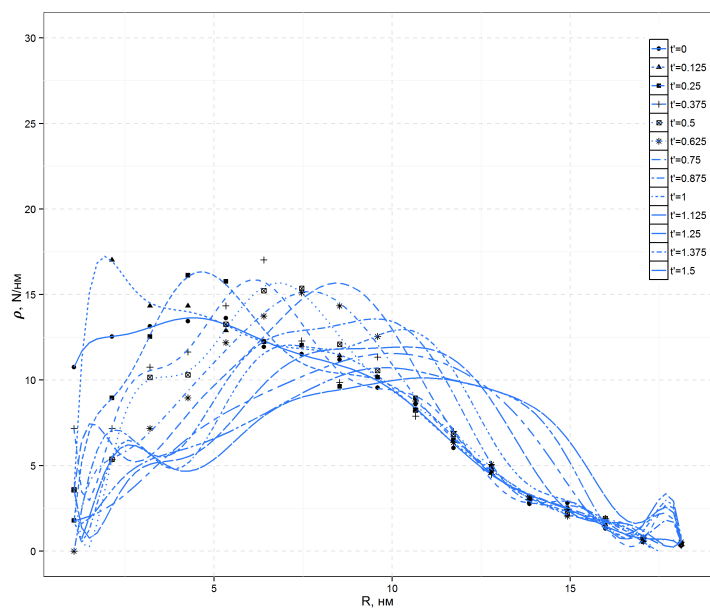


Рис. 8: Радиальная плотность ударной волны. Сектор $30^\circ - 60^\circ$.
Профиль распределения $t' = 0 - 1.5$

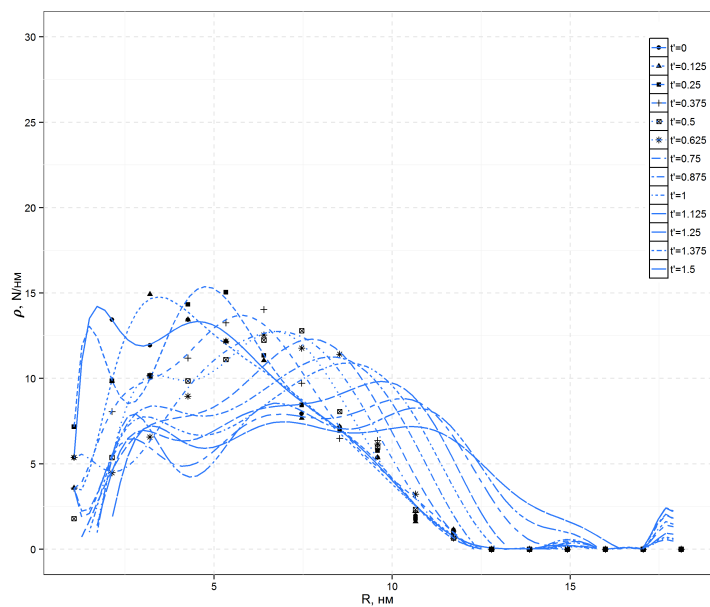


Рис. 9: Радиальная плотность ударной волны. Сектор $60^\circ - 90^\circ$.
Профиль распределения $t' = 0 - 1.5$

Как уже отмечалось ранее, проведенные расчеты динамической структуры подводного взрыва показывают поразительное сходство с известной эволюцией системы: распространение фронта ударной волны с последующим формированием кратера, затем распад ударной волны при достижении границ свободной поверхности и последующий подъем слоя воды над областью взрыва.

Построены профили зависимости радиальной плотности в зависимости от расстояния от эпицентра взрыва. По данным зависимостям, в результате наблю-

дения за фронтом ударной волны и перехода от безразмерного времени t' к реальному времени t , вычислена скорость ударной волны. Распространение ударной волны происходит при скоростях в несколько раз выше порога в 1000 м/с, при котором процесс происходящий в системе уже принято называть взрывным. Скорость распространения ударной волны в случаях, где был использован один и тот же вариант заряда, совпадает. В расчетах было продемонстрировано, что характер возмущений на свободной поверхности зависит как от величины заряда, так и от глубины, на которую он был помещен. Наиболее наглядно эффекты волн на свободной поверхности продемонстрировали первые два основных расчета на «мелкой» воде. В этих областях отчетливо наблюдалось большинство характерных явлений для не заглубленных взрывов на «мелкой» воде, таких как, например, образование на месте взрыва достаточно большого, в сравнении с глубиной области, кратера и образование бора, за фронтом которого наблюдаются небольшие уединенные волны.

В конце главы отмечается, что число частиц, используемых в расчете, влияет на качество и точность полученных данных, поскольку от их количества, а также выбора малости шага разбиения на подсектора, зависит точность аппроксимации, а следовательно, и количественные характеристики определения динамики ударной волны. Расчеты также вскрывают тот факт, что ввиду большой вычислительной ресурсоемкости для расчета методом молекулярной динамики данного класса задач, где требуется моделировать большое количество частиц, этот метод не в достаточной мере распространен.

В **Пятой главе** обсуждается вопрос о том, что до сих пор нет полной физической теории, описывающей количественно зарождение, развитие и затухание ударных волн, а существующие теории носят общий термодинамический характер. Отмечается, что в классических книгах по нелинейным волнам говорится о том, что простейшие нелинейные уравнения описывающие движение кривой могут иметь несколько обобщений: диссипативное – Уравнение Бюргерса и дисперсионное – Уравнение Кортевега-де Вриза (КдВ). Предполагается, что уравнение Бюргерса характерно для систем, где доминирует диффузия (диссипативные системы), в то время как уравнение КдВ характерно для сред без диссипации энергии. Как правило, в механике структура ударных волн анализируется на основе уравнения Бюргерса. Однако, в данной главе делается предположение, что ударные волны, наблюдаемые в главе 4, могут быть также описаны при помощи уравнения Кортевега-де Вриза – Бюргерса, которое делает возможным появление решений в форме ударных волн.

Сопоставление результатов молекулярно-динамических расчетов, касающихся формы ударных волн, с аналитическим описанием уединенных волн, показало, что форма наблюдаемых ударных волн и их временная эволюция напо-

минает такую для уединенных волн уравнения КдВ. Однако, уравнение КдВ является одномерным, а ударные волны – двумерные. Тем не менее, разработанная процедура для наблюдения ударных волн, по существу, сводит двумерное явление к одномерному, поэтому возможно действовать следующим образом. Введя полярную систему координат с центром в центре взрывчатки, можно заметить, что форма ударной волны, распространяющейся внутри кругового сектора, строго зависит от полярных углов (θ_1, θ_2) , определяющих сектор. В принципе, можно уменьшить величину сектора $(\theta_2 - \theta_1)$ до бесконечно малой величины, но это требует огромных вычислительных затрат. В данном случае возможно записать уравнение КдВ для волн распространяющихся вдоль направления \vec{r} в форме

$$u_t + uu_r + \beta u_{rrr} = 0, \quad (6)$$

где коэффициент β характеризует дисперсию в системе. Поскольку функция зависит не только от радиус-вектора, но и так же от полярного угла, получается, что $u = u(r, \theta)$. Кроме того, коэффициент β является постоянным только для однородной сплошной среды. Однако, на картинах временной эволюции подводного взрыва видно, что имеет место неоднородная среда. Эта неоднородность бывает двух видов: одна связана с начальными свойствами среды, другая проявляется со временем. Для простоты, можно предположить, что функция u не зависит от полярного угла, однако, коэффициент β является функцией обоих аргументов, т.е. $\beta = \beta(r, \theta)$. Тогда уравнение КдВ для волны, распространяющейся вдоль направления \vec{r} , может быть записано в форме:

$$u_t + uu_r + \beta(r, \theta)u_{rrr} = 0. \quad (7)$$

Прежде чем анализировать свойства функции, следует упомянуть о физическом смысле функций, выведенных в предыдущих разделах. Это необходимо, поскольку в большинстве книг и статей слишком много внимания уделяется математическим преобразованиям и слишком мало описанию физического смысла полученных функций. В результате, вместо исследования явления изучаются свойства уравнений, которые его моделируют. Кроме того, разные авторы используют различные обозначения для одних и тех же понятий.

Эмпирическая формула для скорости уединенной волны, выведенная Скоттом Расселом, в форме, показанной на Рис. 10, записывается в следующем виде:

$$c^2 = g(h + \eta_0), \quad (8)$$

здесь c – скорость уединенной волны, g – ускорение свободного падения, h – глубина воды, η_0 – максимальный подъем жидкости над уровнем воды. Среди многих исследований Кортевег и де Вриз рассматривали движение мелких волн

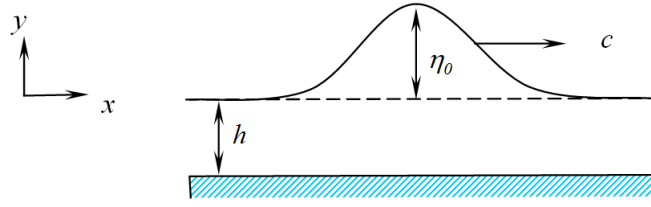


Рис. 10: Уединенная волна

на воде. Они нашли отражение в уравнении

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{3c_g}{2h} \eta \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{1}{2} c_g h^2 \left(\frac{\sigma}{\rho g h^2} - \frac{1}{3} \right) \frac{\partial^3 \eta}{\partial x^3}, \quad (9)$$

где η – подъем уровня водной поверхности, $c_g = \sqrt{gh}$, σ – поверхностное натяжение, ρ – плотность воды. Записывая уравнение КдВ в канонической форме

$$u_t + uu_x + \beta u_{xxx} = 0, \quad (10)$$

мы сводим двумерное явление к одномерному. Так как $\eta(x)$ пропорциональна дополнительной массе, можно рассматривать u как изменение линейной плотности среды. Рассматривая уравнение КдВ на атомарном уровне, мы получили следующее уравнение для стоячей волны:

$$a\zeta''' + 12 \left(1 - \frac{V^2}{c^2} \right) \zeta' - 24\gamma\zeta\zeta' = 0. \quad (11)$$

где ζ – безразмерная линейная плотность деформации межатомной связи. Поскольку деформация межатомной связи ведет либо к увеличению, либо к уменьшению межатомного расстояния, можно рассматривать $\zeta(x)$ как безразмерное изменение линейной плотности среды. Было показано, что постоянная Грюнайна $\gamma = -\frac{a^3 \varphi'''(0)}{2\varphi''(0)}$. Поскольку $\beta \sim 1/\gamma$, можно придать физический смысл дисперсии β , связав ее с кубической аангармоничностью потенциала межатомного взаимодействия. Согласно первоначальной структуре уравнения КдВ, структура функции $\beta(r, \theta)$ имеет два параметра, которые могут изменяться в зависимости от условий эксперимента, плотности ρ и глубины h . В свою очередь эти обе величины связаны с давлением. Если ударная волна распространяется, когда $\theta \sim 0$, плотность и глубина почти не меняются и поэтому коэффициент β почти постоянен, поэтому и форма ударной волны почти постоянна, по крайней мере, после некоторой начальной стадии. Такая ситуация наблюдается для ударных волн, распространяющихся в секторе $0 - 30^\circ$. Другое предельное значение $\theta \sim 90^\circ$. Здесь ударная волна переходит из области высокой плотности и глубины к поверхности, где обе величины незначительны. Согласно первоначальной форме уравнения КдВ $\beta \sim 1/h$, и поэтому дисперсия увеличивается в результате

движения ударной волны к поверхности. Можно понимать это как процесс возбуждения системы. Согласно квантовой механике, любое возбуждение означает, что начальное состояние распадается по крайней мере на два, верхнее из которых имеет меньшую плотность. Аналогичная ситуация имеет место для ударных волн в секторах $30^\circ - 60^\circ$ и $60^\circ - 90^\circ$. В итоге в данной главе получено уравнение для двумерных ударных волн, обобщающее уравнение КдВ для одномерной среды и в полярных координатах имеющее вид $u_t + uu_r + \beta(r, \theta)u_{rrr} = 0$. Также в заключении главы приводится объяснение физического смысла для дисперсии β , соотнесенное с кубическим ангармонизмом потенциала межатомного взаимодействия.

В **заключении** отмечено, что в результате проведенной работы была создана оригинальная программа, написанная на языке программирования C++, которая с помощью метода молекулярной динамики позволяет исследовать подводный взрыв. Написанная программа позволяет задавать размеры расчетной области, выбирать граничные условия и менять глубину расположения взрывчатки от дна, её мощность и форму, с целью изучения динамики подводного взрыва, выяснения характера возмущений на поверхности воды и анализа ударных волн. В рамках молекулярной динамики реализована упрощенная модель, имитирующая взрывчатое вещество. Для описания динамики подводного взрыва были подобраны параметры потенциала взаимодействия Леннард-Джонса, наиболее реалистично моделирующие жидкость. Используя имеющиеся вычислительные мощности, проведена серия расчетов, отражающая динамику подводного взрыва, в двух областях – на глубокой и мелкой воде, при разных параметрах мощности взрыва. Также были получены зависимости радиальной плотности ударной волны от расстояния от эпицентра взрыва. Расчеты показали внешнее соответствие с явлениями возникающими при подводном взрыве. Профили зависимостей радиальной плотности ударной волны от расстояния позволили увидеть, что при распространении высота профиля ударной волны уменьшается со временем, тогда как ширина профиля увеличивается. Форма ударной волны при этом асимметрична. Наиболее представительным результатом этого исследования является то, что наблюдается распад ударной волны на несколько частей. Это явление было проанализировано на основе уравнений Кортевега-де Вриза – Бюргерса и Шредингера.

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Впервые выполнено исследование процесса подводного взрыва методом молекулярной динамики.
2. Впервые дана оценка применимости подхода к решению такого класса динамических задач методом молекулярной динамики.

3. Разработан пакет программ для моделирования подводного взрыва для жидкости Леннард-Джонса.
4. Разработан и реализован алгоритм, позволяющий имитировать взрывчатое вещество и не требующий задания сложной структуры этого вещества.
5. Разработана и реализована специальная техника, позволяющая производить анализ структуры ударных волн, возникающих при подводном взрыве, которые наблюдаются в рамках компьютерных экспериментов при помощи метода молекулярной динамики.
6. Продемонстрированы визуальные картины расчета подводного взрыва, которые показывают поразительное сходство с известной эволюцией системы, а именно: распространение фронта ударной волны, формирование кратера, распад ударной волны при достижении границ свободной поверхности с последующим подъемом слоя воды над областью взрыва.
7. Построены и проанализированы графики распространения радиальной плотности ударной волны во времени. Установлено, что распространение ударной волны происходит при скоростях в несколько раз выше порога в 1000 м/с, при котором процесс происходящий в системе уже принято называть взрывным.
8. Проанализирован распад ударной волны на основе уравнения Кортевега-де Вриза – Бюргерса.

Публикации автора по теме диссертации

1. Иголкин С.И. Молекулярно – динамический подход к моделированию подводного взрыва // XXXVIII Неделя науки СПбГПУ. Материалы межвузовской научной конференции. Часть XIII. – СПб: Издательство Политехнического университета, 2009. с. 174.
2. Igolkin S., Melker A. Molecular Dynamics of Underwater Explosion // Proceedings of the JSC'2010 (Vienna, Austria). 2010. p. 83.
3. Иголкин С.И. Молекулярно – динамическое моделирование подводного взрыва в двумерной жидкости // XXXIX Неделя науки СПбГПУ. Материалы межвузовской научной конференции. Часть XIII. – СПб: Издательство Политехнического университета, 2010. С. 233–234.
4. Igolkin S., Melker A. Molecular Dynamics Approach to Modeling of Underwater Explosion // Proceedings of the NDTCS-11 (Espoo, Finland). 2011. p. 37.

5. Igolkin S., Melker A. Structure of Shock Waves in Underwater Explosion // Proceedings of the NDTCS-15 (Minsk, Belarus). 2013. P. 94–97.
6. Igolkin S., Melker A. Molecular Hydrodynamics of Underwater Explosion // Materials Physics and Mechanics. 2012. Vol. 13, no. 2. P. 147–156.
7. Igolkin S., Melker A. Structure of a shock waves arising in underwater explosion // Materials Physics and Mechanics. 2014. Vol. 20, no. 2. P. 142–147.
8. Igolkin S., Melker A. Molecular hydrodynamics of shallow-water explosions // Materials Physics and Mechanics. 2014. Vol. 20, no. 2. P. 148–158.
9. Igolkin S., Melker A. Molecular hydrodynamics of deep-water explosions // Materials Physics and Mechanics. 2014. Vol. 20, no. 2. P. 159–174.
10. Иголкин С.И., Мелькер А.И. Молекулярная гидродинамика подводного взрыва // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. Т. 194, № 2. С. 54–61.