

Федеральное государственное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр  
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша  
Российской академии наук»

*На правах рукописи*

---

*подпись соискателя*

**Бойков Дмитрий Сергеевич**

**Моделирование газодинамических и упругопластических процессов  
при интенсивном энергокладе в твердый материал**

Специальность 1.2.2 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель  
кандидат физико-математических наук  
Ольховская Ольга Гургеновна

Москва  
2025

## Оглавление

ВВЕДЕНИЕ .....	4
Актуальность темы исследования и степень её научной разработанности .	4
Цель и задачи диссертации. ....	15
Научная новизна .....	15
Теоретическая и практическая значимость работы .....	17
Методология и методы диссертационного исследования .....	17
Положения, выносимые на защиту .....	20
Достоверность результатов.....	21
Апробация результатов .....	21
Публикации .....	23
Личный вклад автора .....	26
Поддержка работы .....	27
ГЛАВА 1. КОМПЛЕКСНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ И УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДОМ ДЕФОРМИРУЕМОМ МАТЕРИАЛЕ.....	28
1.1 Математическая модель газодинамических и упругопластических волновых процессов .....	28
1.2 Материальные уравнения.....	29
1.3 Критерии изменения состояния материала .....	32
1.4 Выводы по Главе 1 .....	35
ГЛАВА 2. ЧИСЛЕННАЯ МЕТОДИКА СКВОЗНОГО РАСЧЕТА НАГРЕВА ВЕЩЕСТВА, АБЛЯЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ .....	37
2.1 Контроль изменения агрегатного состояния среды .....	37
2.2 Выбор уравнения состояния .....	38
2.3 Модель многокомпонентной смеси .....	39
2.4 Способы задания динамической нагрузки .....	40
2.5 Алгоритм сквозного расчета.....	41
2.6 Выводы по Главе 2.....	43
ГЛАВА 3. ПРОГРАММНЫЕ КОМПЛЕКСЫ .....	45

3.1	Вычислительная платформа MARPLE .....	45
3.2	Цифровая платформа KDT.....	67
3.3	Рабочая версия цифровой платформы KDT.....	69
3.4	Интеграция MARPLE & KDT.....	79
3.5	Выводы по Главе 3.....	89
ГЛАВА 4. ЛАГРАНЖЕВ КОД ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ СРАВНИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ .....		91
4.1	Сравнительный анализ результатов моделирования по эйлеровой и лагранжевой методикам .....	92
4.2	Верификация численных моделей с использованием вспомогательных модулей.....	95
4.3	Валидация лагранжевого модуля .....	97
4.4	Выводы по Главе 4.....	105
ГЛАВА 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ СИЛЬНОТОЧНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУЧКОВ НА КОНСТРУКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ.....		107
5.1	Моделирования воздействия РЭП на образец из эпоксидной смолы .....	107
5.2	Моделирования воздействия РЭП на многослойную конструкцию .....	113
5.3	Моделирование воздействия РЭП на композиционный материал с дисперсным наполнителем .....	117
5.4	Выводы по Главе 5.....	130
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....		133
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....		134

## **ВВЕДЕНИЕ**

### **Актуальность темы исследования и степень её научной разработанности**

В современных инженерных разработках широкое применение нашли численные методики оценки стойкости различных конструкционных материалов – как однородных, так и композиционных, армированных, градиентных и др. Соответствующие исследования существенно облегчают создание материалов, которые по своим параметрам должны превосходить традиционные материалы, например, металлы, и в будущем заменить их в силу технологических, экологических и других условий. Так, например, известно, что композиты обладают высокой удельной прочностью, жёсткостью и износостойкостью [1], что позволяет использовать их для создания новых классов конструкций. Весьма активно проводятся работы по использованию этих материалов в аэрокосмической отрасли при проектировании и создании летательных аппаратов [2, 3]. Композиционные материалы прочны, не подвержены коррозии, имеют малый вес, что облегчает транспортировку и монтаж изделий на их основе. По этим причинам предлагается использовать композиционные материалы для магистральных трубопроводов, в частности, проектируемых для эксплуатации в северных регионах [4].

Натурные испытания на разрушение инженерных конструкций из новых материалов, как правило, весьма дороги, поэтому большое значение приобретают экспериментальные исследования, в которых образцы из новых материалов подвергаются различным воздействиям. В большинстве случаев в экспериментах исследуются лишь небольшие образцы, имеющие упрощенную форму. Значительный интерес представляют, в частности, исследования условий разрушения материалов под действием интенсивных импульсных нагрузок. В качестве таковых можно указать релятивистские электронные пучки (Национальный Исследовательский Центр "Курчатовский институт" [5, 6]),

ударно-волновые воздействия (ОИВТ РАН [7 - 9]), ультракороткие лазерные импульсы (Физический институт им. П. Н. Лебедева (ФИАН) [10], Институт электрофизики и электроэнергетики РАН [11]).

Рассмотрим подробнее экспериментальные работы НИЦ "Курчатовский институт" по изучению поведения материалов при воздействии на них сильноточного релятивистского электронного пучка (РЭП). Результаты этих экспериментов были учтены при построении моделей данной диссертации и использовались для валидации созданных численных методик. Эксперименты [5,6] проводились на установке «Кальмар» со следующими параметрами: ток пучка 20–45 кА, его длительность 100–150 нс, максимальная энергия электронов 350 кэВ, характерные значения поверхностной плотности энергии, вложенной РЭП в приповерхностные слои мишени 240–1000 Дж/см<sup>2</sup>.

По схеме экспериментов [5] испытуемый образец (мишень) закреплялся на анодном узле ускорителя. Регистрация свечения плазмы, сформированной при испарении мишени теплом заторможенного потока электронов выполнена в видимом диапазоне спектра с помощью электронно-оптической камеры [12]. Плотность энергии, выделившейся на поверхности полимерной мишени, определялась на основании электротехнических измерений и рентгеновского изображения, зарегистрированного камерой-обскурой. Область взаимодействия пучка с анодом оценивалась по её рентгеновскому изображению, фиксировавшемуся рентгеновской интегральной по времени камерой-обскурой с расширенным динамическим диапазоном. Импульс отдачи на мишени реактивной силой потока плазмы, измерялся специально разработанным мембранным детектором с пьезодатчиком [13]. Масса испаренного вещества измерялась с помощью лабораторных весов.

Скорость разлета испаренного под действием мощного импульсного энерговыведения материала образца в диод ускорителя была вычислена с помощью электронно-оптической регистрации свечения разлетающегося

материала в хронографическом режиме. Оптическая развертка синхронизировалась с током ускорителя. Изображение с экрана электронно-оптической трубки регистрировалось цифровой фотокамерой. С помощью лазерного зондирования в сочетании с электронно-оптической хронографией [14] были построены хронограмма распространения волн сжатия в образце и по ним определены значения времени задержки прихода волны разрушения относительно фронта ударной волны.

На рисунке 1 показан внешний вид анодного узла и мишени.



Рис. 1 – Внешний вид анодного узла и мишени (эксперимент НИЦ "КИ").

Были выполнены серии экспериментов с образцами различных размеров, изготовленными из эпоксидной смолы, оргстекла, полистирола и других материалов [15 - 17], а также многослойными мишенями [18]. Эксперименты с прозрачными материалами позволили наблюдать прохождение волн сжатия в образцах и внутренние разрушения.

Область взаимодействия пучка с мишенью составила  $\sim 1\text{см}^2$ . Была оценена скорость движения границы светящейся области при разлете материала мишени (от 10 до 35 км/с) и показано, что с ростом энерговыклада скорость разлёта

увеличивается. На подвергшихся воздействию образцах визуально наблюдались характерные зоны разрушения: испарение вещества с передней стороны мишени, хрупкое разрушение в объеме материала и отколы на тыльной стороне испытуемого образца.

Ввиду сложности процессов, происходящих внутри полимерных и композиционных материалов при таких экстремальных воздействиях, в эксперименте невозможно проследить за эволюцией всех параметров в объеме образца. Поэтому экспериментальные исследования дополняются математическим моделированием.

Другая серия экспериментов связана с разработками новых технологий создания материалов с уникальными свойствами, которые могут найти применение в различных областях науки и техники. К таким перспективным материалам относятся сферопластики или синтактные пены, формируемые на основе полимерного связующего и стеклянных микросфер. Они уже нашли широкое применение в авиационной и ракетной технике, а также в судостроении, благодаря таким важным свойствам как низкая плотность и теплопроводность. В качестве полимерных связующих синтактных пен наиболее часто применяют терморезистивные (эпоксидные) смолы или кремнийорганические компаунды [19]. Эти материалы, с одной стороны, ослабляют воздействующие потоки энергии посредством напыленных на наполнитель тяжелых металлов, а с другой — демпфируют формирующийся в них механический импульс давления в результате необратимого схлопывания многослойных микросфер [20]. Особое внимание привлекает моделирование разрушения синтактной пены, что создает основу для изучения процессов возникновения и эволюции в синтактных пенах структур типа нановискеров — нитевидных структур, обладающих высокой анизотропией и специфическими физико-химическими характеристиками. Вольфрам, благодаря своим уникальным свойствам, таким как высокая плотность, температура плавления и механическая прочность, является перспективным материалом для создания микросфер. Введение вольфрама в

сферопластик позволяет значительно улучшить его характеристики и расширить область применения.

Процессы при деформировании синтактных пен и пористых материалов при ударно-волновом, динамическом и статическом сжатии достаточно подробно изучены и связаны с особенностями их деформирования при схлопывании пористости [21 - 25]. Большой интерес представляет динамическое нагружение стеклосфер, поверхности которых модифицированы металлическим покрытием, позволяющим повысить их электропроводность и соответственно степень экранирования электромагнитных полей [26].

Экспериментальное изучение тепловых процессов в синтактных пенах при ударно-волновом воздействии показало большое локальное повышение температуры в образующихся «горячих точках» при коллапсе микросфер. Имеется целый ряд возможных механизмов такого нагрева, например, гидродинамическое течение, адиабатический нагрев газа, пластическая и вязкопластическая деформация при высоких скоростях сдвига. Температура образующихся «горячих точек» при коллапсе микросфер и динамика распространения ударной волны в синтактной пене зависит от интенсивности ударной волны и вязкости материала, окружающего микросферу [27, 28]. Важно учитывать, что схлопывание пористости в вольфраме позволяет достигать более высокой плотности вещества и соответственно глубины проникновения в преграду, чем при ударе монолитным металлом [29]. Тепловые и гидродинамические явления лежат в основе недавно обнаруженного формирования нанонитей при коллапсе микросфер, вызванного воздействием ударной волны, причем процессу структурообразования способствует нанесение пленки вольфрама на поверхность стеклосфер [30 - 33]. Поэтому разработка численных методов и алгоритмов детального моделирования энерговыделения при действии ударной волны на синтактные пены и пористые материалы представляется весьма актуальной проблемой.

Одним из факторов, сдерживающих широкое распространение новых материалов при создании испытывающих нагрузки конструкций, является отсутствие в настоящий момент достаточно полной теории поведения конструкционных материалов при различных режимах нагружения, что вызывает необходимость проведения больших объемов экспериментальных исследований для определения характеристик композитов с целью последующего включения в полуэмпирические теории. Однако экспериментальное исследование свойств, включая определение условий разрушения материалов, представляет собой трудоемкую и дорогостоящую задачу. В связи с этим актуальным является создание средств предсказательного моделирования, которое становится все более надежным благодаря применению высокопроизводительной техники, допускающей моделирование процессов на сильно различающихся пространственно-временных масштабах. Надо отметить особую важность разработки средств предсказательного моделирования для анализа процессов при динамическом, интенсивном нагружении.

Вычислительный эксперимент позволяет восполнить многие пробелы экспериментальной части исследований. Так, моделирование позволяет определить характеристики разрушающего воздействия, которые трудно измерить непосредственно с приемлемой точностью. Например, если образцы подвергаются действию потока электронов высокой энергии или лазерного излучения, импульс отдачи, формируемый в образце в результате воздействия реактивных сил, может быть найден в результате гидродинамического расчета, объединенного в методике сквозного типа с расчетом упругопластических волн в неисконденсированной части материала.

Широкий класс прикладных задач в рассматриваемой области требует подробного описания физики быстропротекающих процессов в геометрически сложных объектах с учетом существенно трехмерных эффектов. В то же время необходимо согласованно рассчитывать сразу несколько физических процессов,

таких как динамические процессы, возникающие при переходе материала в другое агрегатное состояние, пластические деформации, объемное разрушение материала, откольные явления. В таких мультифизичных задачах нужно учитывать специфику каждого процесса, как на уровне математической модели, так и в плане численных методов.

Следует обратить внимание на то, что при таком комплексном моделировании речь идет не только об отслеживании границ контактных разрывов, что само по себе является сложной вычислительной задачей (см., например, [34], где предлагается гибридный численный метод для расчета упругих волновых явлений в объектах структуры), но и о фазовых превращениях материала. Целью данной работы было создание методики сквозного расчета, в котором на основании обоснованных критериев изменения состояния материала выбирается модель его термодинамических и упруго-пластических свойств и соответствующим образом модифицируется решаемая система уравнений. Расчетная область при этом может включать как сам испытуемый образец, так при необходимости и окружающую его среду. Подобный подход, несмотря на относительную алгоритмическую сложность, обладает рядом достоинств. Прежде всего, он позволяет воспроизводить все исследуемые динамические процессы одновременно, оценивать их взаимодействие и взаимное влияние, получать и анализировать согласованное решение. Кроме того, не требуется переносить и согласовывать данные, что практически неизбежно при разделении моделирования на отдельные задачи (см., например, [35]).

Решение этих задач требует создания научных кодов, сочетающих современные физические модели и численные методики с передовыми технологиями разработки компьютерных алгоритмов и программирования, и предназначенных для эксплуатации на суперкомпьютерах гибридной архитектуры. Использование современных и перспективных суперкомпьютеров выдвигает новые требования как к численным методам, так и к используемому

программному обеспечению, особенно в части надежности, отказоустойчивости и сопровождения (например, модификация кодов по мере эксплуатации с целью лучшего учета архитектурных особенностей вычислительных систем).

Современный этап развития вычислительной техники отличается не только количественным ростом производительности центральных процессоров, но и качественным сдвигом в архитектуре вычислительных систем, связанным с массовым внедрением графических процессоров в роли специализированных ускорителей. Такой подход позволяет эффективно решать широкий спектр ресурсоёмких задач — от численного моделирования физических процессов до обработки больших объёмов данных — непосредственно на рабочих станциях и компактных кластерных установках, доступных исследовательским коллективам и промышленным предприятиям. Это, в свою очередь, способствует демократизации высокопроизводительных вычислений и расширению их применения в прикладных областях.

Одновременно с эволюцией аппаратной базы наблюдается интенсивное развитие методов математического моделирования. Традиционные детерминированные алгоритмы всё чаще дополняются или заменяются статистическими и гибридными подходами, которые, в свою очередь, всё теснее интегрируются с методами искусственного интеллекта и технологиями глубокого обучения. Подобная конвергенция позволяет не только повысить точность и устойчивость численных решений, но и адаптировать вычислительные модели к специфике конкретных физических явлений — например, к нелинейной динамике многослойных композитных структур под воздействием импульсных радиационных нагрузок. В результате формируется новая методологическая парадигма, в которой классические численные методы и современные ИИ-технологии выступают как взаимодополняющие компоненты единой системы компьютерного моделирования.

Рост доступности как высокопроизводительных, так и стандартных вычислительных комплексов обуславливает необходимость разработки специализированных аппаратно-программных платформ, ориентированных на комплексную поддержку научно-технических расчётов. Основная задача таких платформ — автоматизация и унификация всех этапов вычислительного эксперимента: от подготовки геометрических и физических моделей, задания граничных и начальных условий, до управления расчётным процессом, мониторинга его хода в реальном времени и последующего анализа результатов. При проектировании подобных систем необходимо учитывать современные тенденции в архитектуре вычислительных устройств, особенно в области гибридных высокопроизводительных вычислений (ВПВ), где сочетаются распределённые и симметричные параллельные вычисления.

Современные суперкомпьютеры и вычислительные кластеры, как правило, реализуются в виде масштабируемых гибридных архитектур, построенных на основе модели распределённых вычислений. В таких системах множество вычислительных узлов, каждый из которых оснащён многоядерными центральными процессорами и одним или несколькими специализированными ускорителями (в первую очередь — графическими процессорами), объединяются с помощью высокоскоростных коммуникационных сетей, обеспечивающих минимальные задержки и высокую пропускную способность [36]. Яркими примерами подобных решений являются гибридные кластеры K100 и K60, разработанные в Институте прикладной математики имени М. В. Келдыша Российской академии наук [37]. Архитектура таких систем обладает высокой гибкостью: вычислительные мощности могут наращиваться как за счёт увеличения числа узлов (горизонтальное масштабирование), так и за счёт модернизации компонентов отдельных узлов — например, замены GPU на более производительные модели (вертикальное масштабирование). Это обеспечивает долгосрочную актуальность платформы даже в условиях стремительного

технологического прогресса и растущих требований к производительности.

Что касается программного обеспечения, управление современными гибридными кластерами и суперкомпьютерами осуществляется преимущественно на базе операционных систем семейства UNIX (включая Linux-дистрибутивы), которые обеспечивают устойчивую поддержку многопользовательского и многозадачного режимов, а также безопасный удалённый доступ через стандартные протоколы. Для эффективной реализации параллельных вычислений применяются как стандарты распределённого программирования (например, MPI [38]), так и инструменты для организации внутреннего параллелизма в рамках одного узла (например, OpenMP [39]). Для программирования вычислений на графических процессорах широко используется CUDA Toolkit [40], предоставляющий полный набор компиляторов, библиотек и средств отладки. Кроме того, жизненно важную роль играют специализированные системы управления заданиями, которые обеспечивают планирование вычислительных задач, распределение ресурсов кластера, формирование очередей, контроль выполнения расчётов и гарантированное сохранение результатов.

В Российской Федерации одной из значимых разработок в этой области является Система управления параллельными программными заданиями (СУППЗ) [41], созданная специалистами ИПМ им. М. В. Келдыша РАН совместно с ФГУП «НИИ «Квант». На международном уровне широкое распространение получила система Slurm [42], которая стала де-факто стандартом в большинстве суперкомпьютерных центров мира.

Отдельного внимания заслуживает развитие облачных вычислительных технологий, предлагающих альтернативную модель коллективного использования вычислительных ресурсов. Основной принцип облачных платформ заключается в предоставлении вычислительных мощностей «по требованию» через уровень виртуализации, что позволяет гибко масштабировать

ресурсы в зависимости от текущих задач. Пользователю может быть предоставлен доступ либо к виртуальной машине, либо к изолированному контейнеру (например, на базе Docker [43]) или даже к целому кластеру контейнеров, управляемому оркестратором вроде Kubernetes [44]. Взаимодействие с такими ресурсами осуществляется либо через стандартные SSH-соединения, либо через программные интерфейсы приложений (API), что обеспечивает высокую степень автоматизации. Среди коммерческих облачных решений наибольшую популярность имеют Microsoft Azure [45] и Amazon Web Services [46]; в российском сегменте аналогичные функции предоставляет Yandex Cloud [47]. Каждая из этих платформ реализует собственный набор инструментов для выделения ресурсов, запуска вычислительных задач и мониторинга их выполнения.

Наконец, помимо системного программного обеспечения, для полноценной поддержки жизненного цикла вычислительного эксперимента необходимы специализированные прикладные компоненты: численные библиотеки (например, BLAS, LAPACK, cuBLAS), параллельные прикладные программы, ориентированные на решение задач вычислительной физики, механики, электродинамики и других дисциплин, а также средства подготовки исходных данных и постобработки результатов. Особенно важна интеграция этих инструментов в единые программные комплексы, обеспечивающие сквозной рабочий процесс — от постановки задачи до визуализации и интерпретации полученных данных.

Таким образом, актуальной задачей является исследование средствами математического моделирования поведения материалов и конструкций под действием интенсивных нагрузок, в частности, потоков энергии импульсного характера, и создание инструментария для таких исследований, включающего комплексную математическую модель газодинамических и упругопластических волновых процессов в твердом деформируемом материале, алгоритм сквозного

расчета нагрева вещества, абляционных процессов и упругопластических волновых процессов в материале с учетом его возможных разрушений, а также прикладное программное обеспечение, предназначенное для работы на современных и перспективных высокопроизводительных вычислительных системах и использующее современные подходы к организации вычислительных экспериментов на базе концепции цифровой платформы суперкомпьютерного моделирования.

### **Цель и задачи диссертации.**

Целью диссертационной работы является исследование термомеханических процессов, происходящих в полимерных и композиционных материалах при воздействии на них интенсивных динамических нагрузок.

Для достижения цели диссертационной работы были поставлены и решены следующие задачи.

1. Разработка на основе моделей механики сплошной среды широкодиапазонной математической модели динамических процессов в конденсированной среде при воздействии на нее интенсивных потоков энергии.

2. Разработка численных алгоритмов совместного моделирования газодинамических волн в испаренном материале и динамических волновых процессов в области упругопластического материала с учетом его возможного разрушения.

3. Создание программного обеспечения, предназначенного для сквозного расчета газодинамических и термомеханических нелинейных волновых процессов, приводящих к внутренним разрушениям в материале и откольным явлениям.

4. Моделирование разрушения полимерных и композиционных материалов под действием релятивистских электронных пучков.

### **Научная новизна**

Новизна предлагаемого подхода заключается в сквозном моделировании процессов, происходящих как в диодном промежутке генератора сильноточного импульса релятивистских электронов, так и в мишени, облучаемой данным РЭП. Для этого предполагается выполнять как МГД-моделирование плазменного факела, который формируется в диодном промежутке веществом аблированным с поверхности мишени при воздействии на нее РЭП, а также веществом, которое испаряется с поверхности катода генератора, так и моделирование упругопластического состояния мишени при прохождении по ней ударных волн, порожденных энергетическим и динамическим воздействием вещества при его абляции с поверхности мишени.

Построенная комплексная компьютерная модель основана на известных моделях механики сплошных сред, новым в ней является согласованный расчет газодинамических процессов в испаренном материале, упругих деформаций, пластических течений, объемного разрушения материала и откольных явлений без разделения решения на отдельные задачи. Расчетная область при этом может включать как сам испытуемый образец, так, при необходимости, и окружающую его среду. Данный подход позволяет воспроизводить все исследуемые динамические процессы одновременно, оценивать их взаимодействие и взаимное влияние, получать и анализировать согласованное решение.

Разработаны новая методика динамического контроля изменения агрегатного состояния конденсированной среды с выбором соответствующего УРС и формы учета тензора напряжений и основанный на ней алгоритм совместного расчета нагрева, испарения, динамики испаренного вещества и упругопластических волновых процессов, приводящих к разрушениям в неиспаренном твердом материале. Алгоритм использует описание многокомпонентных многофазных течений в терминах плотностей компонент среды.

Создано новое программное обеспечение, позволяющее проводить

массовые вычислительные эксперименты в области исследования свойств материалов при интенсивных энергетических воздействиях.

Получены новые результаты моделирования экспериментов по испытаниям полимерных и композиционных материалов на установке "Кальмар" в НИЦ "Курчатовский институт".

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Вычислительные эксперименты с набором моделей поведения материалов являются инструментом для определения их прочностных характеристик посредством решения обратных задач с использованием данных многопараметрических численных исследований и экспериментальных результатов [48]. Для обеспечения достоверности таких исследований большое значение приобретает верификация созданных кодов и методик на экспериментальных данных, в том числе и для материалов с известными свойствами. После верификации модели ее можно использовать для полномасштабного моделирования реальных конструкций с целью анализа их прочности при различных воздействиях.

Разработки диссертационной работы найдут применение в инновационных научно-исследовательских и прикладных работах, требующих решения задач физической механики большой вычислительной сложности, а именно: изучении разрушения перспективных полимерных и композитных материалов под действием различных нагрузок. Созданные в результате диссертационной работы компьютерная модель, вычислительный алгоритм и программное обеспечение могут быть использованы при анализе динамических воздействий на материалы и конструкции в инженерной практике, для верификации моделей объёмных разрушений и отколов в хрупких материалах, а также для валидации широкодиапазонных уравнений состояния материалов.

### **Методология и методы диссертационного исследования**

Основным методом исследований в диссертационной работе является математическое моделирование. Система исходных уравнений, описывающая термомеханические эффекты в объекте при воздействии на него интенсивного потока энергии (частицы, ионизирующее излучение) составлена на основе моделей механики сплошной среды, основы которых можно найти, например, в [49]. Из предшествующих работ, в которых обсуждались модели, разработанные применительно к данной предметной области, отметим [50]. Исследование поведения материалов при интенсивном высокоэнергетическом воздействии основано на моделях упругой деформации и пластического течения с реологическими моделями линейно упругой среды (закон Гука), упругопластической (модель Прандтля-Рейса с условиями пластичности Мизеса и Мизеса-Шлейхера, модель Максвелла) и упруговязкопластической среды с учетом релаксации касательных напряжений [51]. Для исследования откольного разрушения материалов при ударно-волновых нагружениях применяются критерии, учитывающие время действия напряжения (интеграл повреждений Тулера– Бучера). Исследование динамики вещества, образующегося при испарении твердотельных образцов, основано на моделях гидродинамики.

Численное решение названных задач выполняется сеточным методом с использованием разностных схем повышенного порядка аппроксимации (модифицированной схемы Лакса-Фридрихса с ограничением потоков [52], с линейной реконструкцией величин при вычислении потоков, схем на основе метода Галеркина с разрывными базисными функциями [53]). Данные подходы известны и широко используются, однако их применение для конкретных задач и различных типов расчетных сеток требует адаптации и оптимизации, что и было осуществлено в рамках данной работы. В частности, при разработках разностных схем, соответствующих мультифизическим физико-математическим моделям механики сплошных сред, высокотемпературных явлений и быстропротекающих процессов, принципиальное значение имеет, наряду с общими требованиями

консервативности, выполнение принципов интегральной согласованности балансов полной энергии и ее отдельных видов (внутренней, кинетической, электромагнитного поля) таким образом, чтобы устранить влияние нефизичных источников энергии аппроксимационного характера [54].

Построение расчётных сеток в областях сложной и произвольной геометрии потребовало разработки многочисленных алгоритмов, ориентированных на генерацию нерегулярных (неоднородных) сеточных структур. Такие сетки исторически возникли в рамках методов конечных элементов, где топологическая связность узлов не задаётся жёсткой регулярной структурой, как в методе конечных разностей, а определяется динамически — с помощью специальных таблиц смежности и алгоритмов поиска соседних узлов. Это позволяет гибко адаптировать сетку под геометрические особенности расчётной области, сохраняя при этом корректность дискретизации дифференциальных операторов.

Для расчетов в данной работе использовались трехмерные сетки, адаптированные к границе расчетной области и структуре изучаемых объектов, в том числе сетки нерегулярной структуры с разными типами элементов (тетраэдры, гексаэдры, треугольные призмы), блочно-структурированные сетки, иерархические локально-адаптивные сетки.

На основании большого объема практических расчетов в настоящей работе за основу была принята использовалась разностная схема, основанная на решении задачи Римана в приближении Лакса-Фридрикса [55], [56]. Данная конечно-разностная схема относится к классу схем, удовлетворяющих принципу невозрастания полной вариации решения (total variation diminishing, TVD, см. [57], [58]). Схема является достаточно экономичной и, при использовании широкодиапазонных данных по свойствам вещества, позволяет с достаточной для практических приложений точностью выполнять сквозные расчеты газодинамических и упругопластических процессов в предметной области

диссертационной работы. Для программной реализации схемы не требуется вычисление собственных векторов матрицы гиперболичности, а использует только максимальные по модулю ее собственные значения (спектральный радиус). Интегрирование системы уравнений по времени выполняется по схеме предиктор-корректор. В целом система в областях гладкости решения имеет первый порядок аппроксимации по пространственной переменной и второй аппроксимации по времени.

Моделирование проводилось с использованием кода MARPLE-3D, разработанного в ИПМ им. М. В. Келдыша РАН [59]. Код был дополнен модулями для расчёта упругопластических процессов на основе широкодиапазонных уравнений состояния, сгенерированных программой THERMOS (ИПМ РАН) [60, 61]. MARPLE реализован на C++ и работает в параллельном режиме как MPI-приложение, что обеспечивает его эффективное выполнение на высокопроизводительных вычислительных системах. Благодаря модульной архитектуре код служит гибкой платформой для решения разнообразных задач механики сплошных сред.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Комплексная компьютерная модель термомеханических явлений в твердом деформируемом материале в результате действия интенсивных потоков энергии.
2. Алгоритм сквозного расчета нагрева, испарения, динамики испаренного вещества и упругопластических волновых процессов, приводящих к разрушениям в неиспаренном твердом материале, основанный на методике динамического контроля изменения агрегатного состояния конденсированной среды.
3. Программная реализация разработанного алгоритма согласованного решения задач гидродинамики и упругопластики на основе объектно-ориентированного проектирования и программирования на языке

программирования C++ (стандарт C++ 14 / C++ 17) с использованием библиотеки OpenMPI в виде предметно-ориентированной версии кода, включенной в состав вычислительной платформы MARPLE. Интеграция вычислительной платформы MARPLE в цифровую платформу KIAM Digital Tool для решения сложных мультифизических задач.

4. Результаты вычислительных экспериментов по моделированию разрушения полимерных и композиционных материалов под действием релятивистских электронных пучков высокой интенсивности, оценки прочностных характеристик исследованных материалов.

### **Достоверность результатов**

Достоверность выполненных исследований обоснована тем, что методология исследования базируется на современных физических и математических моделях, численных методах, и технологиях программирования. Для верификации моделей, алгоритмов и их программных реализаций использовались опубликованные в научной литературе модельные постановки с известными аналитическими и численными решениями и экспериментальные данные.

Достоверность результатов работы подтверждается теоретическими оценками, сравнением с экспериментальными данными и сравнительными расчетами.

### **Апробация результатов**

Основные результаты диссертационной работы были доложены на следующих профильных научных конференциях:

1. **Boikov D. S.** Dynamics of a microsphere with a double-layered shell in a polymer matrix under the action of a shock wave // 17th International Conference “Gas Discharge Plasmas and Their Applications” (GDP 2025) Ekaterinburg, Russia, 2025
2. **Boikov D. S.** End-to-end calculation of thermomechanical processes in composite

- and heterogeneous materials with dynamic control of the state of aggregation // 9th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE-2024), Tomsk, Russia, 2024.
3. Smirnova A. R., **Boykov D. S.**, Tkachenko S. I., Kazakov E. D. Study of the influence of diode plasma of a high-current electron accelerator “Kalmar” on the formation of shock waves in transparent targets // 9th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE-2024), Tomsk, Russia, 2024.
  4. **Boykov D. S.** End-to-end calculation of thermomechanical phenomena in a solid with dynamic control of the aggregate state // XXXIX Fortov International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2024) Kabardino-Balkar Republic of the Russian Federation, 2024
  5. Смирнова А. Р., **Бойков Д. С.**, Казаков Е. Д., Ольховская О. Г., Ткаченко С. И. Моделирование распространения ударных волн в полимерных мишенях, с учётом взаимодействия катодной и анодной плазм в диодном зазоре сильноточного электронного ускорителя «КАЛЬМАР» // LI Международная Звенигородская конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу, Звенигород, РФ, 2024 г.
  6. Смирнова А. Р., **Бойков Д. С.**, Казаков Е. Д., Ольховская О. Г., Ткаченко С. И. Моделирование влияния катодной плазмы на параметры плазмы факела в диодном зазоре сильноточного электронного ускорителя «КАЛЬМАР». // L Международная Звенигородская конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу, Звенигород, РФ, 2023 г.
  7. Olkhovskaya O., **Boykov D.**, Gasilov V., , Tkachenko S., Smirnova A. Study of processes in polymer targets under high-energy exposure // 8th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects, Tomsk, Russia, 2022.
  8. Sharova Y. S., **Boykov D. S.**, Beklemysheva K. A., Vasyukov A. V., Petrov I. B the fracture of materials under intensive short-time loads. // 45th International

Conference on Application of Mathematics in Engineering and Economics, AMEE 2019, Sozopol, Bulgaria, 2019

### **Публикации**

Результаты проведенных исследований опубликованы в 20 научных статьях, список которых представлен в конце автореферата. Их них 19 входят в перечень ВАК, 3 индексируются в базе данных Web of Science (WoS), 8 индексируются в базе данных Scopus.

1. **Бойков Д.С.**, Тарасов Н.И., Болдарев А.С., Кондратьев К.С. интеграция вычислительной платформы MARPLE в цифровую платформу KIAM Digital Tool для решения задач мультифизики // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2025. № 45. С. 1-26. **(перечень ВАК, РИНЦ)**
2. Марков М.Б., Садовничий Д.Н., Ольховская О.Г., **Бойков Д.С.**, Гасилов В.А., Поляков С.В., Грушин А.С. Динамика микросферы с двухслойной оболочкой в полимерном связующем при действии ударной волны // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2025. № 26. С. 1-19. **(перечень ВАК, РИНЦ)**
3. **Бойков Д. С.** Сквозной расчет термомеханических процессов в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Математическое моделирование. 2024. Т. 36. № 4. С. 166-182. **(перечень ВАК, Scopus)**  
DOI: [10.20948/mm-2024-04-11](https://doi.org/10.20948/mm-2024-04-11)
4. Gasilov V.A., Boldarev A.S., Olkhovskaya O.G., **Boykov D.S.**, Sharova Yu.S., Savenko N.O., Kotelnikov A.M. MARPLE: software for multiphysics modelling in continuous media // Numerical Methods and Programming. 2023. Т. 24. № 4. С. 316-338. **(перечень ВАК, ядро РИНЦ)** DOI: [10.26089/NumMet.v24r423](https://doi.org/10.26089/NumMet.v24r423)
5. Гасилов В. А., Болдарев А. С., Ольховская О. Г., **Бойков Д. С.**, Шарова Ю. С., Савенко Н. О., Котельников А. М. MARPLE: программное обеспечение для мультифизического моделирования в задачах сплошных сред // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 37. С. 1-40. **(перечень ВАК, РИНЦ)**  
DOI: [10.20948/prepr-2023-37](https://doi.org/10.20948/prepr-2023-37)

6. **Бойков Д. С.** Сквозной расчет термомеханических явлений в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 56. С. 1-18. (**перечень ВАК, РИНЦ**) DOI: [10.20948/prepr-2023-56](https://doi.org/10.20948/prepr-2023-56)
7. Повещенко Ю. А., Круковский А. Ю., Подрыга В. О., Рагимли П. И. К., **Бойков Д. С.** Численное моделирование пространственных задач гидродинамики с учетом упругих процессов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 7. С. 1-16. (**перечень ВАК, РИНЦ**) DOI: [10.20948/prepr-2023-7](https://doi.org/10.20948/prepr-2023-7)
8. Olkhovskaya O., **Boikov D.**, Gasilov V., Kazakov E., Tkachenko S., Smirnova A. Study of processes in polymer targets under high-energy exposure // В сборнике: Proceedings of 8th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects. Congress Proceedings. Edited by Dr. Dmitry Sorokin and Anton Grishkov. Tomsk, 2022. С. 166-171. (**РИНЦ**) DOI: [10.56761/EFRE2022.S2-O-046201](https://doi.org/10.56761/EFRE2022.S2-O-046201)
9. **Бойков Д. С.**, Ольховская О. Г., Гасилов В. А. Моделирование газодинамических и упругопластических явлений при интенсивном энергокладе в твердый материал // Математическое моделирование. 2021. Т. 33. № 12. С. 82-102. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2021-12-06](https://doi.org/10.20948/mm-2021-12-06)
10. Повещенко Ю. А., Круковский А. Ю., **Бойков Д. С.**, Подрыга В. О., Рагимли П. И. К. Трехмерное моделирование гидродинамических задач с учетом упругих процессов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2021. № 30. С. 1-15. (**перечень ВАК, РИНЦ**) DOI: [10.20948/prepr-2021-30](https://doi.org/10.20948/prepr-2021-30)
11. Григорьев С. К., Бай А. А., **Бойков Д. С.**, Багдасаров Г. А., Шарова Ю. С. Технология адаптивного уточнения сетки для задач механики сплошных сред // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2021. № 86. С. 1-19. (**перечень ВАК, РИНЦ**) DOI: [10.20948/prepr-2021-86](https://doi.org/10.20948/prepr-2021-86)
12. **Boikov D.**, Grigoriev S., Olkhovskaya O., Boldarev A. Implementing a mesh-projection schemes using the technology of adaptive mesh refinement // Lecture

- Notes in Computer Science. 2020. Т. 11958 LNCS. С. 576-583. (**перечень ВАК, WoS, Scopus**) DOI: [10.1007/978-3-030-41032-2\\_66](https://doi.org/10.1007/978-3-030-41032-2_66)
13. Егорова В. А., Воронин Ф. Н., Жуковский М. Е., Марков М. Б., Потапенко А. И., Усков Р. В., **Бойков Д. С.** Модель радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных мелкодисперсных материалах // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 1. С. 85-99. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2020-01-06](https://doi.org/10.20948/mm-2020-01-06)
14. **Бойков Д. С.**, Болдарев А. С., Гасилов В. А. Численный анализ магнитомеханического эффекта в нагревательных трубах. // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 4. С. 3-15. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2020-04-01](https://doi.org/10.20948/mm-2020-04-01)
15. Васюков А. В., Петров И. Б., Беклемышева К. А., Якобовский М. В., Повещенко Ю. А., Гасилов В. А., **Бойков Д. С.** Модель и расчет напряженно-деформированного состояния гидратосодержащей среды при ее частичном растеплении // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2020. № 99. С. 1-23. (**перечень ВАК, РИНЦ**) DOI: [10.20948/prepr-2020-99](https://doi.org/10.20948/prepr-2020-99)
16. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Повещенко Ю. А., Гасилов В. А., **Бойков Д. С.**, Попов С. Б. Однородные разностные схемы для сопряженных задач гидродинамики и упругости // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2019. Т. 161. № 3. С. 377-392. (**перечень ВАК, WoS, Scopus**) DOI: [10.26907/2541-7746.2019.3.377-392](https://doi.org/10.26907/2541-7746.2019.3.377-392)
17. Повещенко Ю. А., Гасилов В. А., Подрыга В. О., Ладонкина М. Е., Волошин А. С., **Бойков Д. С.**, Беклемышева К. А. Разностные схемы согласованной аппроксимации напряженно-деформированного состояния и энергобаланса среды // Математическое моделирование. 2019. Т. 31. № 7. С. 3-20. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.1134/S0234087919070013](https://doi.org/10.1134/S0234087919070013)
18. Sharova Y. S., **Boykov D. S.**, Beklemysheva K. A., Vasyukov A. V., Petrov I. B. The fracture of materials under intensive short-time loads. // В сборнике: AIP

Conference Proceedings. 45. Сер. "Proceedings of the 45th International Conference on Application of Mathematics in Engineering and Economics, AMEE 2019" 2019. С. 070019. **(WoS, Scopus)** DOI: [10.1063/1.5133555](https://doi.org/10.1063/1.5133555)

19. Рагимли П. И., Повещенко Ю. А., Казакевич Г. И., **Бойков Д. С.**, Гасилова И. В. Модель флюидодинамики в пористой среде, содержащей газогидраты // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016. № 119. С. 1-15. **(перечень ВАК, РИНЦ)** DOI: [10.20948/prepr-2016-119](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-119)

20. Гасилов В. А., Круковский А. Ю., Повещенко Ю. А., Цыгвинцев И. П., **Бойков Д. С.** Неявная двухслойная лагранжево-эйлерова разностная схема газовой динамики на основе согласованных аппроксимаций уравнений балансов массы и импульса // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. № 38. С. 1-22. **(перечень ВАК, РИНЦ)**

В результате выполнения диссертационной получены свидетельства о государственной регистрации двух программ для ЭВМ.

1. "СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЙ ПРОГРАММНО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КОМПЛЕКС "СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ" Багдасаров Г.А., Бойков Д.С., Болдарев А.С., Гасилов В.А., Грушин А.С., Ольховская О.Г., Поляков С.В., Пузырьков Д.В., Тарасов Н.И., Усков Р.В. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2021615641, 09.04.2021. Заявка № 2021614671 от 02.04.2021.
2. ПРОГРАММНЫЕ МОДУЛИ РАСЧЕТА ЭФФЕКТОВ ТЕПЛООВОГО И ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОБЪЕКТЫ Багдасаров Г.А., Бойков Д.С., Болдарев А.С., Гасилов В.А., Ольховская О.Г. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019617547, 17.06.2019. Заявка № 2019616469 от 04.06.2019.

#### **Личный вклад автора**

Лично автором выполнены:

- формулировка комплексной компьютерной модели термомеханических явлений в твердом деформируемом материале;
- разработка алгоритма совместного расчета нагрева, испарения, динамики испаренного вещества и упругопластических волновых процессов, приводящих к разрушениям в неиспаренном твердом материале.
- реализация данной численной методики в программном комплексе MARPLE;
- интеграция вычислительной платформы MARPLE в цифровую платформу KIAM Digital Tool;
- проведение всех расчетов и анализ полученных результатов.

### **Поддержка работы**

Вычисления проводились с помощью гибридного суперкомпьютера K60, установленного в Суперкомпьютерном Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Работа была поддержана грантами РФФИ 21-11-00362, 23-21-00248, 25-61-00018 и проектом МЦФПМ № 25 -09.

# ГЛАВА 1. КОМПЛЕКСНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ И УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДОМ ДЕФОРМИРУЕМОМ МАТЕРИАЛЕ

## 1.1 Математическая модель газодинамических и упругопластических волновых процессов

Исходная система уравнений, описывающая термомеханические эффекты в объекте, подвергающемся воздействию интенсивного потока энергии (частицы, ионизирующее излучение), основана на моделях механики сплошной среды [62, 63]. Полная система уравнений включает уравнения и определяющие соотношения (кинематические, физические), описывающие гидрогазодинамику испаряемого материала, упругие, пластические волны, вязкопластические деформации и разрушение в твердом остатке мишени. Динамические процессы в материале объекта в широком диапазоне параметров состояния моделируются в приближении локального термодинамического равновесия.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla(\rho \vec{w}) &= 0; \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho w_i + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho w_i w_k + P \delta_{ik}) &= 0; \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho E + \frac{1}{2} \rho \vec{w}^2 \right) + \nabla \left( (\rho E + \frac{1}{2} \rho \vec{w}^2 + P) \vec{w} \right) &= 0. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Система уравнений, используемая для расчета волновых процессов в деформируемом твердом теле, соответствует модели упругопластических деформаций:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial w_i}{\partial t} &= F_i + \nabla_j \sigma_{ij}; \\ \rho \frac{\partial E}{\partial t} &= \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} + \nabla(\chi \nabla T) + Q; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\overset{\circ}{s}_{ij} + 2G\dot{\lambda}s_{ij} &= 2G\left(\dot{\varepsilon}_{ij} + \frac{1}{3\rho}\frac{\partial\rho}{\partial t}\delta_{ij}\right) - 3\alpha K(T - T_0)\delta_{ij}; \\
\overset{\circ}{s}_{ij} &= \frac{\partial s_{ij}}{\partial t} + s_{ik}W_{kj} - W_{ik}s_{kj}; \quad W_{ij} = \frac{1}{2}(\nabla_i w_j - \nabla_j w_i); \\
\sigma_{ij} &= -\nabla_i P + s_{ij} + ((3\eta - 2\mu)\dot{\varepsilon}_{ij} + 2\mu\dot{\varepsilon}_{ij}); \\
\dot{\varepsilon}_{ij} &= \frac{1}{2}(\nabla_i w_j + \nabla_j w_i); \quad \dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{ij}\delta_{ij}/3; \\
\dot{\lambda} &= \frac{3}{2Y_0^2}\sigma_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}^{(pl)} \\
\delta_{ij} &= \begin{cases} 1, & \text{при } i = j, \\ 0, & \text{при } i \neq j. \end{cases}
\end{aligned} \tag{1.2}$$

В системе (1) – (2) используются следующие обозначения:  $t$  – время,  $\rho$  – плотность,  $\vec{w} = (w_x, w_y, w_z)^T$  – скорость,  $E$  – удельная внутренняя энергия,  $P$  – давление,  $T$  – температура,  $\sigma$  – тензор напряжений,  $s$  – девиатор тензора напряжений  $\dot{\varepsilon}$  – тензор скоростей деформаций,  $\dot{\lambda}$  – удельная мощность пластической деформации,  $\vec{F}$  – вектор внешних сил,  $Q$  – внешний энерговклад,  $\chi$  – коэффициент теплопроводности,  $G$  – модуль сдвига,  $\eta$  и  $\mu$  – упругие постоянные Ламэ,  $\alpha$  – коэффициент теплового расширения,  $K$  – модуль объемного сжатия,  $Y_0$  – предел текучести. Уравнение для девиатора напряжений записано через производную Яумана  $\overset{\circ}{s}_{ij}$  с тем, чтобы учесть отсутствие напряжений при поворотах тела как целого.

## 1.2 Материальные уравнения

Система законов сохранения (1.1) – (1.2) должна быть дополнена уравнениями состояния (УРС) и реологическими соотношениями, которые содержат информацию о свойствах конкретного вещества. При ударном сжатии или импульсном нагреве материала ионизирующим излучением возникают высокие концентрации энергии. Они приводят к перестройке кристаллической структуры вещества, плавлению, испарению, диссоциации и ионизации.

Возникает необходимость моделировать свойства вещества в широком диапазоне изменения давления, плотности и температуры. При построении широкодиапазонных УРС необходимо использовать различные модели, имеющие существенно разные области применимости. Выбор адекватных материальных уравнений является одним из важных факторов, определяющих точность газодинамических и упругопластических расчетов.

В предлагаемых методиках использовались заранее рассчитанные УРС в табличной форме, подготовленные с помощью программного комплекса ТЕРМОС [61]. Таблицы УРС содержат зависимости давления, внутренней энергии, теплопроводности и оптических свойств материала от его плотности и температуры, тем самым замыкая систему (1.1) – (1.2).

В комплексе программ ТЕРМОС реализованы следующие апробированные на большом количестве практических задач модели, предназначенные для расчета уравнений состояния и оптических характеристик конструкционных материалов и рабочих сред и подробно описанные в книге [60]:

- Обобщенная модель Томаса-Ферми применима при высоких температурах и давлениях.
- Модели ионизационного равновесия Саха-Больцмана с потенциалами ионизации, энергиями возбуждения, полученными либо из эксперимента, либо с использованием многоконfigurационного приближения Хартри-Фока, в том числе с учетом молекулярных состояний, применимы при сравнительно малых плотностях и низких температурах вплоть до комнатных условий.
- Эффективный вариант модели Хартри-Фока-Слэтера и Дирака-Фока-Слэтера необходим для расчетов термодинамических и оптических свойств (спектральных характеристик, коэффициентов электронной теплопроводности плазмы и т.п.).

Комплекс программ ТЕРМОС позволяет рассчитывать табличные уравнения состояния для большинства химических элементов, а также для веществ, имеющих сложный химический состав. Для смеси элементов наиболее универсальным условием равновесия является равенство химических потенциалов компонент смеси, причем объем "молекулы" смеси должен быть равен сумме объемов отдельных компонент. Для плазмы кроме равенства химических потенциалов при равновесии должны выполняться равенства электронных плотностей и электронных давлений компонент смеси. В основе методики расчета ионизационного равновесия в плазме сложного химического состава лежит модель Саха.

Для описания жидкой и твердой фазы вещества при низких температурах предназначены полуэмпирические уравнения состояния, в котором учитываются фазовые переходы и возможность наличия метастабильных состояний. Данные модели также реализованы в программном комплексе ТЕРМОС.

Уравнение состояния QEOS [64, 65] основано на простых полуэмпирических моделях жидкости и твердого тела. Тепловое движение ионов описывается многофазным уравнением состояния, сочетающим законы Дебая, Грюнайзена, Линдемманна и законы подобия для жидкости. Зависящий от температуры коэффициент в формуле для давления для конкретного элемента уточняется с использованием экспериментального значения температуры Дебая. Вклад электронов вычисляется с использованием полуэмпирической холодной кривой, тепловые электронные свойства находят из модифицированной статистической модели Томаса–Ферми. Ранее построенные по полуэмпирической модели QEOS таблицы состояний успешно использовались для моделирования действия РЭП по методике последовательного расчета газодинамических и упругих волн на примере мишени из плексигласа [66]

Термодинамически согласованное одиннадцатиконстантное УРС-11 [67,68] строится на основе определяемых экспериментальным путем констант для

нормальных условий и экстраполяции с помощью теоретических зависимостей в области существования плазмы с учетом ее неидеальности и вырождения электронного компонента. Давление и удельная внутренняя энергия складывается из потенциальных, тепловых и электронных составляющих. УРС-11 успешно применяется для расчетов интенсивных динамических воздействий на различные материалы [35].

В данных УРС при плотности вещества меньшей нормальной в некотором диапазоне температур изотермы давления немонотонны с изменением знака первой производной по плотности, то есть существуют критические параметры и область двухфазных состояний в том же смысле, что и в уравнении состояния Ван-дер-Ваальса. Учитывать такие состояния необходимо при расчетах параметров механического действия. В то же время при решении газодинамических уравнений такое поведение изотерм давления может приводить к серьёзным проблемам со сходимостью решения сеточных систем и требует коррекции. Для этого в данной области строится так называемая Максвелловская конструкция, т.е. рассчитывается равновесие фаз из условия выполнения правила Максвелла для давления насыщенного газа.

Расчет волновых процессов в твердом веществе можно проводить и в приближении баротропной среды; в этом случае уравнение состояния принимается в аналитическом виде. Наиболее распространенными являются эмпирические УРС в форме Ми-Грюнайзена и в форме Тэйта [69]. Модифицированное уравнение Тэйта включает коэффициенты, которые представляются как функции температуры и определяются на основе экспериментальных данных.

### **1.3 Критерии изменения состояния материала**

Перед началом испытаний (а также соответствующего расчета) исследуемый образец находится, как правило, в твердотельном состоянии при нормальных условиях. Его моделирование необходимо выполнять на основе

системы (1.1) – (1.2) с полным тензором напряжений.

При воздействии на мишень ионизирующего излучения его энергия частично или полностью поглощается в образце, материал вследствие возгонки мгновенно переходит в газообразное состояние, минуя жидкую фазу, происходит абляция части материала с поверхности образца. Это явление имеет место, когда удельная внутренняя энергия  $E$  материала становится больше либо равна его энергии абляции  $Q_s$ . Таким образом определяется область, которая переходит в газообразное состояние. В этой области следует учитывать только гидростатическое давление.

При этом в образце в результате действия реактивных сил возникает волна сжатия. Вслед за волной сжатия формируется волна разрежения. Оценивая амплитуду волны разрежения можно определить области разрушения материала.

Переход материала из упругого в пластичное состояние определяется по критерию Мизеса:

$$\sigma_{eq} = Y_0.$$

Здесь  $\sigma_{eq}$  – эквивалентное напряжение,  $Y_0$  – предел текучести.

$$\sigma_{eq} = \sqrt{3/2} \sqrt{2J_2}$$

$J_2$  – второй инвариант тензора напряжений ( $s_{ij}$  – компоненты девиатора напряжений):

$$2J_2 = (s_{xx})^2 + (s_{yy})^2 + (s_{zz})^2 + 2[(s_{xy})^2 + (s_{yz})^2 + (s_{zx})^2].$$

В пластической области помимо упругих компонент девиатора напряжений следует учитывать также пластические деформации.

При расчете напряженно-деформированного состояния материала необходимо выделять области объемного разрушения, которые работают исключительно на сжатие. Для этого используются критерии, определяющие условия перехода материала в состояние разрушения. Большое число таких критериев описано в литературе и реализовано в программных пакетах. См.,

например, обзор [70], а также обзор, приведенный в работе [71], был проведён анализ ряда критериев прочности - включая критерий максимального нормального напряжения, критерии Мизеса, Мора–Кулона, Друкера–Прагера, а также специализированные критерии для композитов: Хашина, Пака, Цая–Хилла и Цая–Ву с точки зрения их применимости к моделированию разрушения полимерных композиционных материалов. Особое внимание уделялось учету специфических механизмов зарождения и развития трещин, характерных именно для полимерных матриц и их взаимодействия с армирующими волокнами. Как правило, такие критерии формулируются на основе анализа и статистического обобщения данных, полученных экспериментальным путем. Не существует единого критерия, который был бы лучше всего применим к данному материалу при любых условиях. В случае отсутствия достаточного набора экспериментальных данных необходим перебор всех основных критериев с выбором самого адекватного результата. Одной из важных задач численного моделирования является валидация критериев разрушения для изучаемых материалов и видов воздействия на основе сравнения результатов расчетов и натурных экспериментов.

В данной работе использовались следующие критерии для областей объемного разрушения.

**Критерий максимального напряжения.** Критерий максимального напряжения рассчитывается как максимальное отношение фактических напряжений к предельным напряжениям  $\sigma_{ij}^c$ , определенным в системе координат материала слоя. Критериальная функция прочности записывается в виде

$$\left( \left| \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^c} \right|, \left| \frac{\sigma_{yy}}{\sigma_{yy}^c} \right|, \left| \frac{\sigma_{zz}}{\sigma_{zz}^c} \right|, \left| \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xy}^c} \right|, \left| \frac{\sigma_{xz}}{\sigma_{xz}^c} \right|, \left| \frac{\sigma_{yz}}{\sigma_{yz}^c} \right| \right)_{\max} \leq 1.$$

**Квадратичный критерий Мизеса — Хилла.** Для моделирования разрушения композиционных материалов используется анизотропный квадратичный критерий

$$F(\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + G(\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + H(\sigma_{yy} - \sigma_{xx})^2 + L\sigma_{xy}^2 + M\sigma_{xz}^2 + N\sigma_{yz}^2 \leq 1;$$

$$F = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(\sigma_{yy}^c)^2} + \frac{1}{(\sigma_{zz}^c)^2} - \frac{1}{(\sigma_{xx}^c)^2} \right); \quad G = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(\sigma_{xx}^c)^2} + \frac{1}{(\sigma_{zz}^c)^2} - \frac{1}{(\sigma_{yy}^c)^2} \right);$$

$$H = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(\sigma_{xx}^c)^2} + \frac{1}{(\sigma_{yy}^c)^2} - \frac{1}{(\sigma_{zz}^c)^2} \right); \quad L = \frac{1}{(\tau_{xy}^c)^2}; \quad M = \frac{1}{(\tau_{xz}^c)^2}; \quad N = \frac{1}{(\tau_{yz}^c)^2}.$$

Здесь  $\tau_{ij}^c$  – пороги разрушения при сдвиговом нагружении.

**Интегральный критерий Тулера — Бутчера.** Более полное и детальное описание процесса разрушения в композиционных материалах достигается, если рассматривать его как событие, протекающее во времени. Одним из широко применяемых критериев, учитывающих время действия напряжения, является интеграл повреждений Тулера-Бучера

$$D = \int_0^t (\sigma_0 - \sigma(t))^\lambda dt$$

Здесь  $\sigma(t)$  – напряжение разрушения,  $\sigma_0$  – максимальное главное напряжение,  $\lambda$  – постоянная материала,  $t$  – время, когда происходит разрушение,  $D$  – интеграл разрушения (материальная постоянная).

#### 1.4 Выводы по Главе 1

Построена комплексная компьютерная модель термомеханических явлений, происходящих в твердом деформируемом материале в результате действия интенсивных потоков энергии. Уравнения динамики сплошной среды записаны в форме основных законов сохранения. Новизна предлагаемого подхода заключается в согласованном расчете газодинамических процессов в испаренном материале, упругих деформаций, пластических течений, объемного разрушения материала и откольных явлений без разделения решения на отдельные задачи. Расчетная область при этом может включать как сам испытываемый образец, так, при необходимости, и окружающую его среду. Данный подход позволяет воспроизводить все исследуемые динамические процессы одновременно,

оценивать их взаимодействие и взаимное влияние, получать и анализировать согласованное решение.

Выбраны материальные уравнения и критерии изменения состояния материала, замыкающие модель и обеспечивающие возможность сквозного расчета.

Результаты данной главы опубликованы в работах:

1. **Бойков Д. С.** Сквозной расчет термомеханических процессов в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Математическое моделирование. 2024. Т. 36. № 4. С. 166-182. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2024-04-11](https://doi.org/10.20948/mm-2024-04-11)
2. **Бойков Д. С.** Сквозной расчет термомеханических явлений в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 56. С. 1-18. (**перечень ВАК, РИНЦ**) DOI: [10.20948/prepr-2023-56](https://doi.org/10.20948/prepr-2023-56)
3. **Бойков Д. С.,** Ольховская О. Г., Гасилов В. А. Моделирование газодинамических и упругопластических явлений при интенсивном энергокладе в твердый материал // Математическое моделирование. 2021. Т. 33. № 12. С. 82-102. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2021-12-06](https://doi.org/10.20948/mm-2021-12-06)
4. Егорова В. А., Воронин Ф. Н., Жуковский М. Е., Марков М. Б., Потапенко А. И., Усков Р. В., **Бойков Д. С.** Модель радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных мелкодисперсных материалах // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 1. С. 85-99. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2020-01-06](https://doi.org/10.20948/mm-2020-01-06)

## ГЛАВА 2. ЧИСЛЕННАЯ МЕТОДИКА СКВОЗНОГО РАСЧЕТА НАГРЕВА ВЕЩЕСТВА, АБЛЯЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ

В данной главе представлено описание разработанного алгоритма сквозного расчета нагрева, абляции материала объекта воздействия, течения возникающего при этом газоплазменного потока, а также формирования импульса отдачи в твердом материале, приводящего к возникновению упругопластических волн и, при достаточно высокой амплитуде напряжений, к разрушениям. Алгоритм основан на динамическом контроле изменения агрегатного состояния конденсированной среды с выбором соответствующего УРС и формы тензора напряжений.

### 2.1 Контроль изменения агрегатного состояния среды

Введем индикатор состояния материала – целочисленную переменную  $\Psi$ . Ее значение вычисляется на каждом временном шаге расчета в каждой ячейке расчетной сетки в соответствии с критериями, представленными в разделе 1.3:

$$\Psi = \begin{cases} 0, & \text{при } E \geq Q_s; \\ 1, & \text{при } E < Q_s \text{ и } \sigma_{ij} < \Sigma_l \text{ и } \sigma_{eq} < Y_0; \\ 2, & \text{при } E < Q_s \text{ и } \sigma_{ij} < \Sigma_l \text{ и } \sigma_{eq} = Y_0; \\ 3, & \text{при } E < Q_s \text{ и } \sigma_{ij} \in \mathbf{Z}. \end{cases}$$

Здесь  $E$  – удельная внутренняя энергия,  $Q_s$  – энергия абляции,  $\sigma_{ij}$  – компонента тензора напряжений,  $\Sigma_l$  – критическое напряжение,  $\sigma_{eq}$  – эквивалентное напряжение,  $Y_0$  – предел текучести,  $\mathbf{Z}$  – разрушенная область.

Если индикатор состояния равен 0, среда газообразная, 1 – упругая, 2 – упругопластическая, 3 – область разрушения. Поведение среды описывается формой тензора напряжений  $\sigma$  в (1.2). В зависимости от значения индикатора состояния тензор напряжений принимает следующую форму:

$$\sigma_{ij}(\Psi) = \begin{cases} \sigma_{ij}(0) = \sigma_{tr} \delta_{ij} \\ \sigma_{ij}(1) = s_{ij} + \sigma_{tr} \delta_{ij}, \Delta s_{ij} = \Delta s_{ij}^{(e)} \\ \sigma_{ij}(2) = s_{ij} + \sigma_{tr} \delta_{ij}, \Delta s_{ij} = \Delta s_{ij}^{(e)} - 2G\dot{\lambda} s_{ij} \\ \sigma_{ij}(3) = \sigma_{tr} \delta_{ij}, \sigma_{tr} \leq 0 \end{cases}$$

$s_{ij}$  – тензор девиатора напряжений,  $\sigma_{tr} = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$  – гидростатическое давление,  $\Delta s_{ij}^{(e)}$  – приращение упругих компонент девиатора напряжений,  $G$  – модуль сдвига,  $\dot{\lambda} = \frac{3}{2Y_0^2} (s_{11}\dot{\varepsilon}_{11}^{(p)} + s_{22}\dot{\varepsilon}_{22}^{(p)} + s_{33}\dot{\varepsilon}_{33}^{(p)})$  – удельная мощность пластической деформации.

При расширении модели могут быть введены дополнительные значения переменной  $\Psi$ , соответствующие новым состояниям материала, включаемым в модель.

## 2.2 Выбор уравнения состояния

Для определения термодинамических параметров среды при достаточно высокой скорости изменения ее структуры важен учет неравновесности при фазовых переходах или при изменении агрегатного состояния материала. Для вещества в газообразном, жидком, пластическом или разрушенном состоянии используется "равновесное" УРС (рассчитывается равновесие фаз из условия выполнения правила Максвелла для давления насыщенного газа), при этом в твердотельной части образца учитываются фазовые переходы и двухфазные состояния. Здесь используется "неравновесное" УРС в табличной или аналитической форме, Максвелловская конструкция не применяется.

$$P(\rho, T, \Psi) = \begin{cases} \Psi = 0 - \text{равновесное УРС;} \\ \Psi = 1 - \text{неравновесное УРС;} \\ \Psi = 2 - \text{равновесное УРС;} \\ \Psi = 3 - \text{равновесное УРС.} \end{cases} \quad (2.1)$$

При этом для газообразной среды используется табличное полуэмпирическое УРС, а для конденсированных сред – аналитическое УРС.

Критерий перехода:

$$P(\rho, T, \Psi) = \begin{cases} \Psi = 0 - \text{табличное УРС, } E \geq Q_s; \\ \Psi = 1, 2, 3 - \text{аналитическое УРС, } E < Q_s. \end{cases} \quad (2.2)$$

### 2.3 Модель многокомпонентной смеси

В общем случае система (1.1) – (1.2) может описывать динамику многокомпонентной смеси, например, образца, состоящего из нескольких материалов или композиционного материала с разрешенной внутренней структурой.

Будем считать, что смесь состоит из  $N$  компонент,  $\alpha_n$  – массовая концентрация  $n$ -й компоненты (отношение массы  $n$ -й компоненты к полной массе смеси),  $\rho_n$  – плотность  $n$ -й компоненты,  $n = 1 \div N$ .

$$\sum_{n=1}^N \alpha_n = 1, \quad \sum_{n=1}^N \rho_n = \rho, \quad \rho_n = \alpha_n \rho.$$

Для каждой компоненты смеси решается отдельное уравнение неразрывности, но уравнения импульса и энергии общие для всей смеси. Между компонентами имеет место механическое ( $\vec{w}_n = \vec{w}$ ) и термодинамическое ( $T_n = T$ ) равновесие.

Для смеси газов используется модель взаимопроникающих континуумов, где в любом макроскопическом объеме присутствуют все компоненты в соотношении, определяемом массовыми концентрациями, каждая из компонент заполняет объем, совершенно не испытывая влияния других компонент, находящихся в том же объеме.

Зная плотности компонент  $\rho_n$  и УРС  $P_n = P_n(\rho_n, T)$  и  $E_n = E_n(\rho_n, T)$  для каждой из них, можно найти полное давление и полную внутреннюю энергию смеси.

$$P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T) = \sum_{n=1}^N P_n(\rho_n, T), \quad E(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T) = \sum_{n=1}^N \alpha_n E_n(\rho_n, T).$$

Сеточная реализация данной модели в программном комплексе MARPLE [59], которая использовалась в настоящей работе, предполагает, что в каждой

ячейке расчетной сетки может находиться только одно вещество в твердом состоянии, заполняющее эту ячейку целиком. Газы и жидкости в расчетной ячейке могут смешиваться. В рамках такого подхода оказывается возможным моделировать многофазные среды, представляя различные состояния одного и того же вещества как отдельные компоненты. Переход из одного состояния в другое осуществляется на основании критериев, описанных в разделе 1.3, которые применяются к расчетной ячейке в целом. Выбор УРС для каждой компоненты выполняется в соответствии с условиями (2.1) и (2.2) так, как это описано в разделе 2.2.

#### **2.4 Способы задания динамической нагрузки**

Предлагаемая численная методика позволяет описывать нагружение исследуемого образца в форме внешней силы  $\vec{F} = \vec{F}(x, y, z, t)$  и/или энерговклада  $Q = Q(x, y, z, t)$ , которые учитываются в первом и втором уравнениях подсистемы (1.2). В обоих случаях предполагается зависимость нагрузки от времени и пространственных координат. Такой энерговклад может быть, например, результатом воздействия на образец ионизирующего излучения. В ряде расчетов для задания энерговклада в материал использовались результаты статистического моделирования переноса фотонов и электронов в веществе [72, 73]. В предположении, что время действия нагрузки (1 – 100 нс) много меньше времени развития волновых процессов и формирования разрушений в образце, (1 – 10 мкс) оказывается возможным не включать в схему сквозного расчета моделирование первичного физического процесса (взаимодействия излучения с веществом), а использовать его результаты качестве источников вторичных радиационно-индуцированных процессов (газодинамических и упруго-пластических). Такой подход применялся, например, в работе [74]. В других случаях пространственное и временное распределение энерговклада удается получить из экспериментальных данных, например, [5].

## 2.5 Алгоритм сквозного расчета

На рис. 2.1 представлена блок-схема алгоритма сквозного расчета, на основе решения системы уравнений (1.1) – (1.2) в декартовых координатах в полной трехмерной постановке.

Расчеты выполняются на трехмерных пространственных сетках, адаптированных к границе расчетной области и структуре изучаемых объектов, в том числе используются сетки нерегулярной структуры с разными типами элементов (тетраэдры, гексаэдры, треугольные призмы), блочно-структурированные сетки, иерархические локально-адаптивные сетки. Все расчетные величины определены в ячейках сетки, при построении разностных схем используются средние значения по ячейке.

Процедура интегрирования по времени реализует принцип суммарной аппроксимации основной системы уравнений на основе расщепления по физическим процессам. Данный принцип делает возможным построение универсального алгоритма продвижения по времени, допускающего независимый расчет всех уравнений, включенных в основную систему. Более того, алгоритм допускает использование явных или неявных аппроксимаций по времени в зависимости от типа конкретного рассматриваемого члена уравнения, представляющего определенный физический процесс. Таким образом, для компонент, соответствующих гиперболической подсистеме из общей системы уравнений, применяется явная аппроксимация, в то время как для параболических/эллиптических уравнений применяются неявные схемы. Решение уравнений гидродинамики-упругопластики по всей области испаренного и неиспаренного материала выполняется по явным разностным схемам, форма тензора напряжений выбирается в зависимости от агрегатного состояния вещества, которое предварительно анализируется.

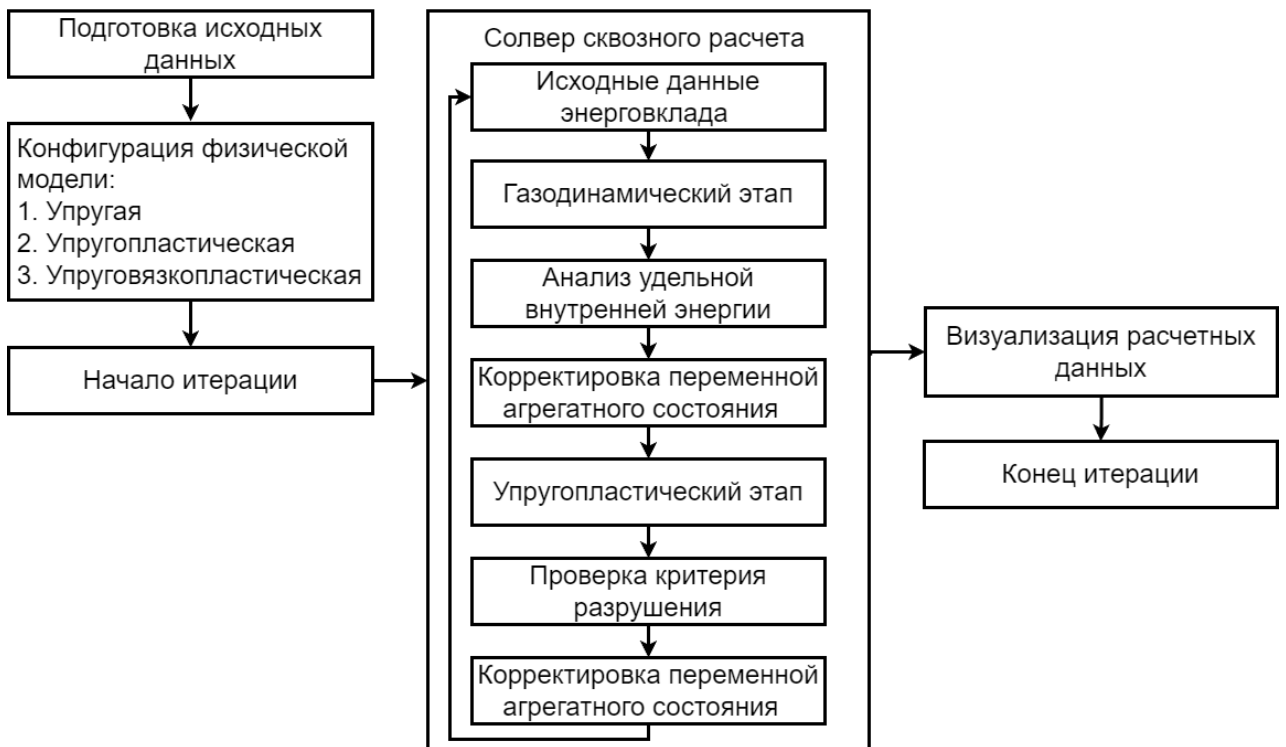


Рисунок 2.1. Блок-схема алгоритма сквозного расчета

Расчёт газодинамических волн в испаренном материале и динамических процессов в области упругопластического материала выполняется на основе центрально-разностной схемы повышенного порядка аппроксимации, построенной на нерегулярной сетке общего вида путем модификации известной схемы, основанной на решении задачи Римана в приближении Лакса-Фридрихса. Интегрирование по времени осуществляется по схеме предиктор-корректор. В областях гладкости решения схема имеет первый порядок аппроксимации по пространственной переменной и второй порядок аппроксимации по времени. Этот метод обладает достаточным уровнем разрешения волновых структур по пространству и времени при умеренных затратах вычислительных ресурсов. В целом разработанная методика воспроизводит процессы взаимодействия прямых и отражённых волн с учетом различного рода граничных и контактных условий. При использовании релевантных реологических моделей и критериев разрушения методика позволяет корректно моделировать разрушение материала и волновой

отклик от разрушенных областей.

## 2.6 Выводы по Главе 2

Разработана численная методика совместного расчета нагрева, испарения, динамики испаренного вещества и упругоэластических волновых процессов, приводящих к разрушениям в неиспаренном твердом материале. Ее новизна заключается в применении динамического контроля изменения агрегатного состояния конденсированной среды с выбором соответствующего уравнения состояния и формы учета тензора напряжений, а также использовании описания многокомпонентных многофазных течений в терминах плотностей компонент среды.

Построен алгоритм сквозного расчета газодинамических и упругоэластических процессов, обеспечивающий суммарную аппроксимацию базовой системы уравнений и выполнение законов сохранения. Для аппроксимации уравнений модели упругоэластических деформаций на трехмерных сетках нерегулярной структуры используются разностные схемы повышенного порядка аппроксимации, уже реализованные и успешно применяющиеся в программном комплексе MARPLE.

Результаты данной главы опубликованы в работах:

1. Бойков Д. С. Сквозной расчет термомеханических процессов в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Математическое моделирование. 2024. Т. 36. № 4. С. 166-182. (перечень ВАК, Scopus) DOI: 10.20948/mm-2024-04-11
2. Бойков Д. С. Сквозной расчет термомеханических явлений в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 56. С. 1-18. (перечень ВАК, РИНЦ) DOI: 10.20948/prepr-2023-56
3. Повещенко Ю. А., Круковский А. Ю., Подрыга В. О., Рагимли П. И. К., Бойков Д. С. Численное моделирование пространственных задач гидродинамики с

- учетом упругих процессов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 7. С. 1-16. (перечень ВАК, РИНЦ) DOI: 10.20948/prepr-2023-7
4. Повещенко Ю. А., Круковский А. Ю., Бойков Д. С., Подрыга В. О., Рагимли П. И. К. Трехмерное моделирование гидродинамических задач с учетом упругих процессов // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2021. № 30. С. 1-15. (перечень ВАК, РИНЦ) DOI: 10.20948/prepr-2021-30
  5. Егорова В. А., Воронин Ф. Н., Жуковский М. Е., Марков М. Б., Потапенко А. И., Усков Р. В., Бойков Д. С. Модель радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных мелкодисперсных материалах // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 1. С. 85-99. (перечень ВАК, Scopus) DOI: 10.20948/mm-2020-01-06

## ГЛАВА 3 ПРОГРАММНЫЕ КОМПЛЕКСЫ

### 3.1 Вычислительная платформа MARPLE

Разработанные в настоящей работе численные методики реализованы в рамках объектно-ориентированного параллельного многомерного эйлерова мультифизического программного комплекса MARPLE, созданного в Институте прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН для научного моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах [59, 75].

Изначально MARPLE разрабатывался как исследовательский инструмент для численного анализа процессов в экспериментах с высокоплотной импульсной плазмой [76–78]. В ходе последующей эволюции код был существенно расширен и трансформировался в универсальную платформу, применимую к широкому спектру задач из различных областей физики и механики.

Архитектура MARPLE построена на основе независимых структур данных и алгоритмов, что обеспечивает высокую степень переиспользования компонентов. Особое внимание уделено эффективной работе с нерегулярными (неструктурированными) сетками — одной из ключевых сложностей при распределённых вычислениях. В комплексе реализованы оригинальные структуры данных, оптимизированные для хранения и обработки неструктурированных сеток, что обеспечивает как гибкость геометрического описания расчётной области, так и масштабируемость на многопроцессорных системах.

MARPLE поддерживает трёхмерное моделирование в областях сложной формы на гибридных сетках, включающих элементы различных типов: тетраэдры, гексаэдры, треугольные призмы и четырёхгранные пирамиды. Допускается использование элементов с неплоскими гранями, что повышает точность аппроксимации криволинейных границ. Для двумерных задач

поддерживаются треугольные и четырёхугольные ячейки.

Благодаря своей модульности и расширяемости, MARPLE на сегодняшний день представляет собой многофункциональную вычислительную платформу, ориентированную на проведение многоцелевых численных экспериментов. Комплекс успешно применялся при решении задач в следующих областях [59]:

- физика высокоэнергетической плотной плазмы — моделирование Z-пинчей, капиллярных разрядов для лазерного ускорения частиц, взаимодействие интенсивных лазерных импульсов с твёрдотельными мишенями;
- астрофизика — численное исследование эволюции нейтронных звёзд;
- механика конденсированных сред — анализ отклика твёрдых тел на воздействие мощных энергетических потоков.

### **3.1.1. Модель разработки вычислительной платформы MARPLE**

Вычислительная платформа MARPLE изначально проектировался как исследовательский код, ориентированный на две взаимосвязанные цели: во-первых, на выполнение параллельных расчётов прикладных начально-краевых задач в полной трёхмерной постановке; во-вторых — на разработку и тестирование численных схем повышенного порядка точности на неструктурированных сетках со смешанными типами элементов. Важнейшим требованием к архитектуре комплекса стала его высокая адаптируемость: пользователь должен иметь возможность гибко настраивать физические модели, уравнения, граничные условия, уравнения состояния и численные методы, а также легко интегрировать новые компоненты в существующую кодовую базу.

Учитывая эти задачи и ограниченный состав разработчиков, для жизненного цикла MARPLE была выбрана гибридная итерационно-инкрементная модель разработки, дополненная элементами экстремального

программирования. В частности, активно применяются практики коллективного владения кодом и регулярного рефакторинга. Такой подход обеспечивает, в порядке убывания приоритета:

- оперативную реализацию и практическую проверку новых идей;
- гибкость в ответ на изменение или уточнение требований;
- быстрое выявление и устранение ошибок;
- вовлечение конечных пользователей в процесс тестирования.

Главным преимуществом этой модели является возможность незамедлительно апробировать гипотезы — будь то новая разностная схема, модификация алгоритма или альтернативная физическая модель — в условиях реальных или контрольных расчётов. Зачастую именно такой эмпирический путь остаётся единственным надёжным способом оценить работоспособность и эффективность нововведения.

### **3.1.2. Проектирование вычислительной платформы MARPLE**

С учётом специфики исследовательских задач, решаемых в геометрически сложных трёхмерных областях, при создании вычислительной платформы MARPLE был принят объектно-ориентированный (ОО) подход к проектированию и реализации кода. Он обеспечивает гибкую и модульную организацию программной архитектуры, что особенно важно при необходимости поддерживать множество вариантов физических моделей, численных методов и граничных условий.

В MARPLE геометрическая сложность расчётных областей естественным образом отражается в иерархии геометрических объектов. Помимо них в системе выделяются ключевые вычислительные сущности:

- солверы — для решения отдельных уравнений или подсистем уравнений;
- аппроксимации — реализующие сеточные схемы для различных дифференциальных операторов;

- граничные условия — связывающие физические ограничения с конкретными сегментами граничной сетки;  
а также другие компоненты, детально описанные в последующих разделах.

Такая объектная декомпозиция задачи соответствует первым этапам ОО-разработки — анализу и проектированию. Для визуализации структуры классов и взаимодействия объектов используется унифицированный язык моделирования UML (Unified Modeling Language) [79]. Иерархия вычислительных объектов MARPLE представлена подробно в разделе 3.2.

### **3.1.3. Программирование MARPLE**

Для реализации программного комплекса MARPLE был выбран язык программирования C++, сочетающий выразительность объектно-ориентированной парадигмы с высокой производительностью. Такие его средства, как наследование, виртуальные функции и шаблоны, особенно эффективны при работе с нерегулярными расчётными сетками, позволяя гибко организовывать иерархии вычислительных и геометрических объектов. Широкое распространение языка обеспечивает хорошую переносимость кода, а стремление разработчиков стандарта к обратной совместимости упрощает долгосрочную поддержку программного обеспечения.

Архитектура MARPLE, построенная на возможностях C++, отличается высокой адаптируемостью: она позволяет быстро вносить изменения, добавлять новые функциональные модули и поддерживать читаемость кода даже при росте его сложности. Комплекс совместим с основными операционными системами — MS Windows, GNU/Linux, BSD UNIX, macOS — и может выполняться на широком спектре аппаратных платформ: от персональных компьютеров и мощных рабочих станций до многопроцессорных вычислительных систем коллективного пользования. Требованием к платформе является наличие компилятора, поддерживающего

стандарт C++20.

### 3.1.4. Архитектура MARPLE

В основе программного комплекса MARPLE, рассматриваемого как абстрактная вычислительная среда, лежат две ключевые концепции:

1. Вынесение универсальных сервисных функций на уровень вычислительной среды — включая ввод/вывод данных, операции с расчётными сетками, поддержку параллельных вычислений и динамическое управление вычислительными объектами. Это позволяет разработчикам физических солверов сосредоточиться исключительно на реализации предметной логики, минимизируя дублирование кода и обеспечивая единообразие интерфейсов.
2. Автоматизированное управление жизненным циклом вычислительных объектов различных типов — таких как солверы (на уровнях вычислительного домена, физической подобласти и элементарных задач), аппроксимации и граничные условия. Создание и уничтожение этих объектов осуществляется динамически в соответствии с текущей конфигурацией расчётной задачи.

В соответствии с этими принципами и методологией объектно-ориентированного проектирования предметная область была декомпозирована на следующие логические модули:

- работа с расчётными сетками,
- аппроксимации дифференциальных операторов,
- солверы,
- граничные условия,
- материальные уравнения (описание термомеханических свойств

вещества).

Структура иерархий классов внутри модулей, а также связи между ними, представлены на рис. 3.1 (показаны только существенные классы и отношения; модули выделены рамками).

Особенности архитектуры управления вычислениями в MARPLE:

- Главный модуль (MARPLE\_Driver) координирует весь вычислительный процесс: инициирует этапы расчёта, рассылает управляющие сообщения другим компонентам и не выполняет ресурсоёмких операций напрямую.
- Главный солвер (MainSolver), управляемый MARPLE\_Driver, отвечает за операции верхнего уровня с физическими подобластями. Каждый экземпляр MainSolver привязан строго к одному вычислительному узлу, назначенному при инициализации.
- Физический солвер (PhysicalDomainSolver), в свою очередь, реализует вычисления на уровне отдельной физической подобласти под управлением соответствующего MainSolver. Каждый объект PhysicalDomainSolver работает на одном вычислительном узле и обслуживает ровно одну физическую подобласть. При этом вычислительный домен может включать произвольное положительное число таких подобластей, каждая из которых обрабатывается независимым экземпляром PhysicalDomainSolver.



Рис. 3.1: Диаграмма классов UML: архитектура программного комплекса.

В архитектуре программного комплекса MARPLE реализована многоуровневая система вычислительных объектов, обеспечивающая гибкость и масштабируемость при решении мультифизических задач в трёхмерных областях сложной геометрии на нерегулярных (в том числе блочных) сетках, состоящих из элементов различных типов.

Элементарные солверы (ElementalSolver) отвечают за численное решение отдельных уравнений или их подмножеств в пределах одной физической подобласти на одном вычислительном узле. Совокупность таких солверов обеспечивает полную аппроксимацию всей системы уравнений, определённой в данной подобласти. Например, при совместном моделировании теплопроводности, джоулева нагрева и переноса излучения могут использоваться два элементарных солвера: один — для уравнения теплопроводности, другой — для совместного решения двух оставшихся уравнений. Управление всеми ElementalSolver осуществляется вышестоящими солверами физических подобластей.

Для каждого элементарного солвера определён собственный набор допустимых элементарных граничных условий (ElementalSolverBC), что обеспечивает корректную постановку задачи на уровне конкретного уравнения.

Центральную роль в архитектуре играет совместно используемая база аппроксимаций (Shared Approximation Base, SAB), предоставляющая унифицированный и прозрачный доступ ко всем сеточным операторам. Благодаря SAB достигается значительная экономия оперативной памяти: структуры данных для аппроксимаций создаются динамически только при необходимости и уничтожаются сразу после завершения расчётов, а дублирование кода минимизировано.

Унифицированный доступ к термодинамическим и транспортным свойствам вещества обеспечивается через объекты класса MatterProperties, которые предоставляют уравнения состояния и материальные коэффициенты, специфичные для каждой физической подобласти.

Геометрическое описание расчётной области построено на основе аппарата топологических комплексов [80] и реализовано в виде иерархии классов дискретной модели (см. рис. 3.1). Эта иерархия поддерживает работу с

сетками произвольной размерности и позволяет эффективно представлять сложные геометрии, включая гибридные блочные сетки.

Поддержка геометрического параллелизма интегрирована непосредственно в структуру сетки: каждый вычислительный домен содержит фиктивные блоки (FictiveBlocks), включающие копии граничных элементов соседних доменов. Эти элементы помечаются специальными флагами, позволяющими вычислительным объектам различать локальные и «соседние» ячейки. Фиктивные блоки также используются для реализации симметрий — например, периодических или зеркальных граничных условий.

Для обеспечения балансировки нагрузки расчётная область, содержащая  $M$  физических подобластей, при запуске на  $N$  вычислительных узлах разбивается на  $M \times N$  доменов: каждая физическая подобласть делится на  $N$  частей, по одной на узел. Список всех дискретизаций хранится в объекте класса `DiscretizedDomain` и обрабатывается главным солвером (`MainSolver`).

Наличие нескольких физических подобластей отражено в иерархии классов: объект `DiscretizedRegion` описывает дискретизацию одной подобласти в пределах одного вычислительного домена. Для задания межобластных и внешних граничных условий используются так называемые «суперэлементы» — списки сеточных элементов, принадлежащих границам между подобластями или внешней поверхности расчётной области.

Для снижения связности компонентов и обеспечения гибкой настройки без перекомпиляции кода каждый вычислительный объект, физическая подобласть и граница снабжены уникальными текстовыми псевдонимами. Через реестр полиморфных объектов (не показан на рис. 3.1) любой компонент системы может быть получен по своему идентификатору и типу из любого места программы. Это позволяет динамически конфигурировать солверы, граничные условия, материальные модели и другие элементы. Единственным недостатком такого подхода является большое количество конфигурационных

параметров (подробнее см. подраздел 3.1.9).

### **3.1.5. Сторонние разработки**

Программный комплекс MARPLE интегрирует ряд сторонних библиотек, инструментов и платформ для реализации ключевых функций: подготовки расчётной области, декомпозиции сетки, параллельного решения систем уравнений, сжатия данных и визуализации результатов.

Для компактного хранения внешних данных — таких как сеточные файлы, выходные данные для визуализации и контрольные точки восстановления расчёта — используется библиотека `zlib` [81]. Поскольку `zlib` написана на языке C, её прямое использование из C++-кода может быть неудобным и подвержено ошибкам. Для упрощения работы применяются открытые C++-обёртки (например, `gzstream`, `zipstream`), предоставляющие стандартный потоковый интерфейс ввода-вывода.

Подготовка геометрической модели, разметка границ и подобластей, а также генерация сетки осуществляются с помощью платформы `Salome` [82, 83]. Эта система поддерживает как визуальное проектирование, так и импорт моделей из CAD-систем, а также включает средства для последующего анализа и визуализации результатов расчётов.

Для распределения сетки по вычислительным узлам используется библиотека `ParMETIS` [84] — один из наиболее распространённых инструментов для многопроцессорной декомпозиции графов, лежащих в основе неструктурированных сеток. В состав MARPLE входят специальные утилиты, автоматизирующие подготовку распределённых сеточных данных на основе её возможностей.

При решении больших разреженных систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при построении неявных разностных схем, применяется библиотека `Aztec` [85]. Она реализует параллельные итерационные методы на основе подпространств Крылова, эффективные даже

для плохо обусловленных или нестационарных задач. Aztec, в свою очередь, опирается на стандартные численные пакеты BLAS и LAPACK, которые обычно поставляются в оптимизированном виде производителями вычислительных систем. В MARPLE разработаны специальные классы для работы с распределёнными разреженными матрицами и интеграции с API Aztec.

Параллельное выполнение обеспечивается посредством стандарта MPI [38]. Для упрощения взаимодействия с ним в MARPLE реализованы C++-обёртки, предоставляющие более естественный для языка интерфейс и скрывающие низкоуровневые детали обмена сообщениями. Благодаря многоуровневой архитектуре солверов и сеточных классов, разработчик элементарного солвера, как правило, не сталкивается с явными аспектами распределённых вычислений — вся логика параллелизма инкапсулирована на уровне вычислительной среды.

Сборка проекта организована с использованием системы CMake [86], что обеспечивает кроссплатформенность и совместимость с различными компиляторами и средами разработки.

### **3.1.6. Реализованные физические модели**

В состав программного комплекса MARPLE входят следующие основные физические модели:

одножидкостная двухтемпературная магнитогидродинамическая (МГД) модель динамики плазмы;

модель диффузии электромагнитного поля;

модель теплового баланса плазмы;

двухжидкостная МГД-модель;

модель течения многокомпонентной плазмы;

модель деформируемого твёрдого тела;

набор материальных уравнений для описания термодинамических и

транспортных свойств вещества.

Численное решение задач базируется на использовании широкодиапазонных уравнений состояния, а также моделей переноса излучения и оптических свойств материалов. Комплекс поддерживает расчёты на блочно-структурированных и неструктурированных сетках, включая элементы различных типов: тетраэдры, гексаэдры, треугольные призмы и др.

Алгоритмы солверов построены на основе методов высокого разрешения, обеспечивающих строгое выполнение законов сохранения. Интегрирование полной системы уравнений осуществляется в рамках подхода физического расщепления, что позволяет эффективно комбинировать разнородные физические модели в едином вычислительном процессе.

### 3.1.7. Организация расчета

Решение прикладных начально-краевых задач математической физики в рамках программного комплекса MARPLE условно разделяется на три этапа:

- постановка задачи,
- численное решение,
- анализ результатов.

Этим этапам соответствуют три основных компонента архитектуры MARPLE: препроцессор, солвер и постпроцессор (см. рис. 3.2).



Рис. 3.2: Диаграмма UML: три основных компонента.

Препроцессор отвечает за построение расчётной сетки, маркировку граничных (а при необходимости — и внутренних) элементов для последующего задания начальных и граничных условий, а также за декомпозицию сетки по вычислительным узлам в случае параллельного расчёта. Результатом его работы является сеточный файл во внутреннем формате MARPLE.

Солвер осуществляет инициализацию задачи (задание начальных и граничных условий) и выполняет непосредственное численное интегрирование системы уравнений в расчётной области. По завершении расчёта солвер формирует выходные файлы с результатами моделирования в одном из поддерживаемых форматов.

Постпроцессор предназначен для визуализации и анализа полученных данных. В качестве основного инструмента постобработки в MARPLE используется, но не ограничивается им, широко распространённая платформа ParaView [87].

### 3.1.8. Подготовка данных расчётной области

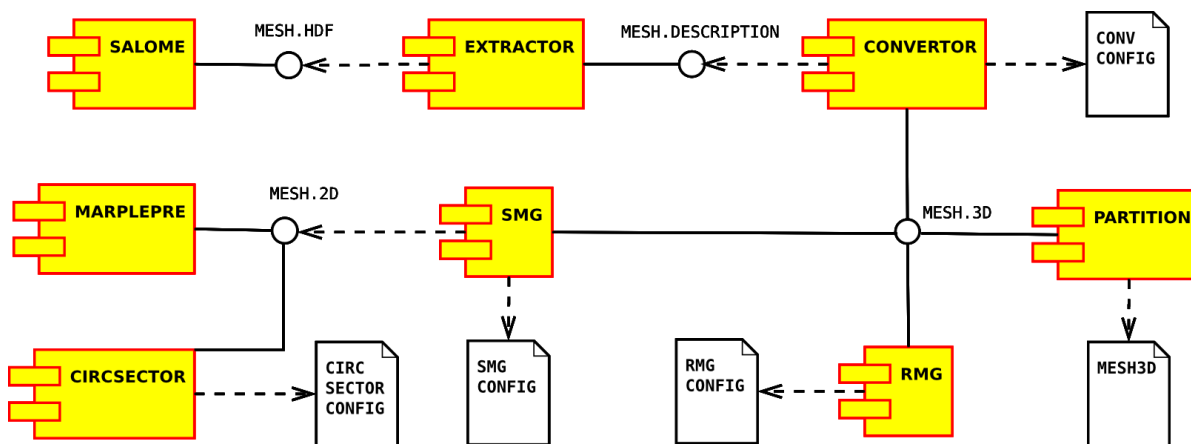


Рис. 3.3: Диаграмма UML: компоненты препроцессора.

На момент написания диссертации препроцессор программного комплекса MARPLE поддерживает шесть основных способов задания геометрии, дискретизации и декомпозиции расчётной области (см. рис. 3.3):

1. RMG — распределённый генератор трёхмерных структурированных сеток в прямоугольной области с поддержкой различных симметрий (включая параллельный перенос с поворотом и зеркальную симметрию), задания функций локальной плотности узлов и произвольных координатных преобразований.
2. SMG — распределённый инструмент для построения трёхмерных сеток путём вытягивания готовых двумерных сеток (сгенерированных,

например, в *MarplePre*) вдоль заданной кривой с постоянным или переменным шагом.

3. *MarplePre* — последовательная графическая программа для интерактивного задания двумерных областей и генерации в них треугольных сеток методом фронтальной триангуляции; поддерживается локальное сгущение или разрежение сетки по пространству.
4. *CircSector* — специализированный последовательный генератор смешанных (треугольно-четырёхугольных) сеток в круговом секторе заданного угла и радиуса.
5. *Salome* — открытая платформа для подготовки, расчёта и анализа [82], из которой в MARPLE используется только модуль подготовки данных [83].
6. *Partition* — распределённая утилита для геометрической декомпозиции уже построенной трёхмерной сетки из  $M$  физических подобластей на  $N$  вычислительных доменов.

Дополнительно, хотя и не отображено на диаграмме, предусмотрен седьмой, наиболее гибкий способ: программное создание сетки «вручную» посредством вызова низкоуровневых API препроцессора из отдельной программы на C++. Этот подход требует значительных усилий, но даёт полный контроль над структурой сетки.

Многообразие методов подготовки данных обусловлено двумя факторами. Во-первых, разработка универсального препроцессора — трудоёмкая и длительная задача. Во-вторых, на практике часто возникает необходимость быстро проводить как модельные, так и прикладные расчёты. При этом специализированные инструменты оказываются значительно эффективнее универсальных: например, построение смешанной сетки в круговом секторе с помощью *CircSector* и *SMG* выполняется на порядок

быстрее, чем аналогичная операция в Salome.

### **3.1.9. Организация вычислительного эксперимента**

Солвер — центральный компонент программного комплекса MARPLE — обладает двумя характерными чертами:

во-первых, он ориентирован на решение мультифизических задач, охватывающих широкий спектр физических моделей;

во-вторых, имеет исследовательскую направленность — будучи «научным» кодом, он предназначен не только для решения прикладных задач и сопровождения физических экспериментов, но и для апробации новых моделей, численных схем и архитектурных решений.

По своей сути MARPLE представляет собой вычислительный каркас (framework) для параллельных расчётов в трёхмерных областях сложной геометрии на гибридных нерегулярных сетках, дополненный конкретной реализацией приложения для моделирования задач механики сплошных сред в виде набора полиморфных вычислительных объектов.

Вся конфигурация солвера разделена на два уровня:

1. настройка самого каркаса MARPLE под конкретное приложение;
2. параметризация приложения под отдельный расчёт.

Оба уровня реализованы через текстовые конфигурационные файлы, что позволяет полностью задавать физическую модель, систему уравнений, граничные условия и численную схему без пересборки исходного кода. Основным файлом верхнего уровня является USERTASK (см. рис. 3.4), в котором указываются:

- имена входных и выходных файлов (включая сеточный файл MESH.3D);
- пути к четырём основным конфигурационным файлам;
- интервал модельного времени;
- график сохранения точек визуализации и восстановления;

- параметры ведения журнала событий.

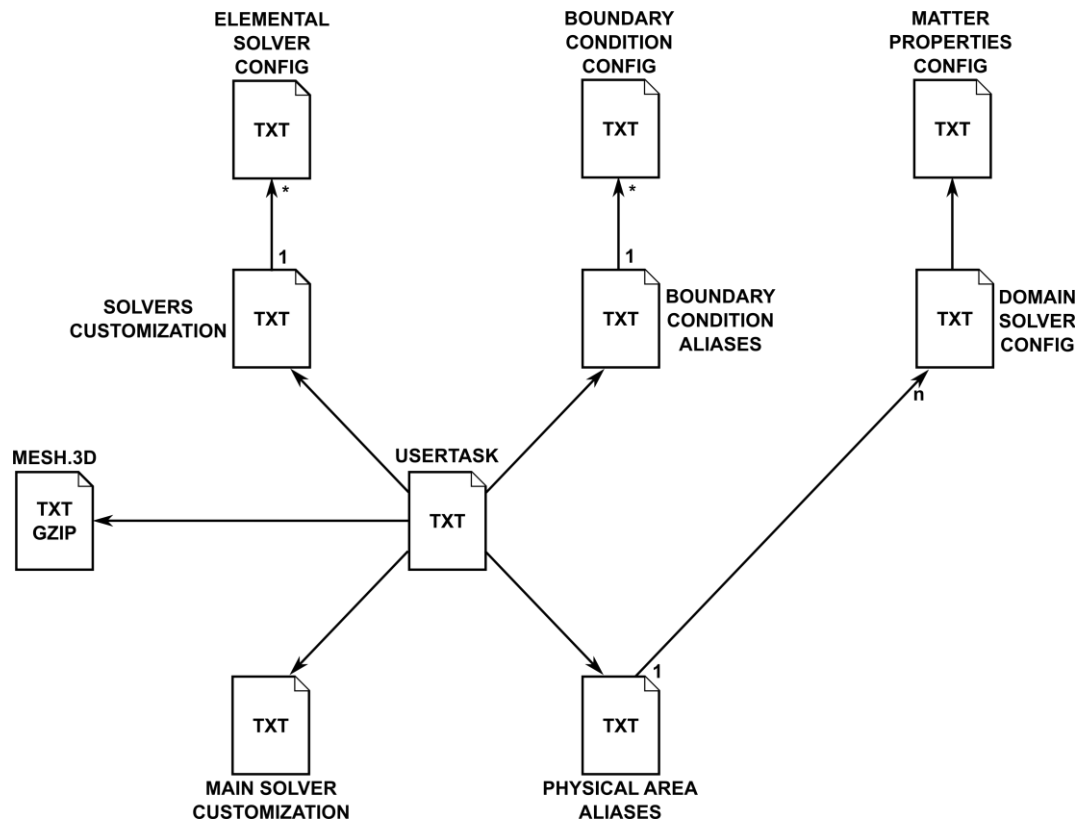


Рис. 3.4: Структура конфигурационных файлов солвера MARPLE (показаны лишь основные разделы и файлы, обязательные для запуска любого расчета)

Остальные конфигурационные файлы определяют детали вычислительного процесса:

- MAIN SOLVER CUSTOMIZATION — выбор реализации главного солвера;
- PHYSICAL AREA ALIASES — сопоставление псевдонимов физических подобластей (заданных в MESH.3D) с соответствующими солверами уровня физической области (этот файл фактически адаптирует каркас MARPLE под конкретное приложение);
- SOLVERS CUSTOMIZATION — привязка элементарных солверов к этапам расчётного алгоритма;
- BOUNDARY CONDITION ALIASES — связь псевдонимов границ с

элементарными солверами и их граничными условиями;

- MAIN SOLVER CONFIG — параметры главного солвера (формат контрольных точек, стратегия резервного копирования и др.);
- DOMAIN SOLVER CONFIG — настройки солверов физических подобластей (выбор уравнений состояния, список сохраняемых величин);
- ELEMENTAL SOLVER CONFIG — параметры конкретных элементарных солверов (зависят от их типа);
- MATTER PROPERTIES CONFIG — описание уравнений состояния для каждой физической подобласти;
- BOUNDARY CONDITION CONFIG — детальная конфигурация граничных условий;
- MESH.3D — бинарный или текстовый файл во внутреннем формате MARPLE, содержащий сетку, маркировку физических подобластей и границ, а также информацию о симметриях.

Таким образом, гибкая система конфигурирования на основе текстовых файлов обеспечивает полный контроль над постановкой задачи и максимальную адаптируемость комплекса к новым физическим моделям и численным методам без необходимости изменения и перекомпиляции исходного кода.

### **3.1.10. Солвер механики твердого деформируемого тела**

В настоящем разделе представлены компоненты программного комплекса MARPLE, разработанные и реализованные автором диссертации в рамках решения задач термомеханики твёрдых тел.

Автором предложен и реализован алгоритм сквозного расчёта, объединяющий моделирование газодинамических явлений и термомеханических процессов в единой вычислительной схеме. Алгоритм обеспечивает численное решение системы уравнений (1.1)–(1.2) в полной трёхмерной постановке в декартовых координатах. Реализация выполнена в

виде специализированных C++-классов, интегрированных в архитектуру MARPLE в соответствии с его объектно-ориентированной моделью.

На рис. 3.5 приведена диаграмма, отражающая структуру разработанных автором классов, их взаимосвязи между собой и с существующими компонентами MARPLE. Для наглядности на диаграмме показаны только ключевые классы и атрибуты, необходимые для понимания логики интеграции и функциональной роли новых модулей.

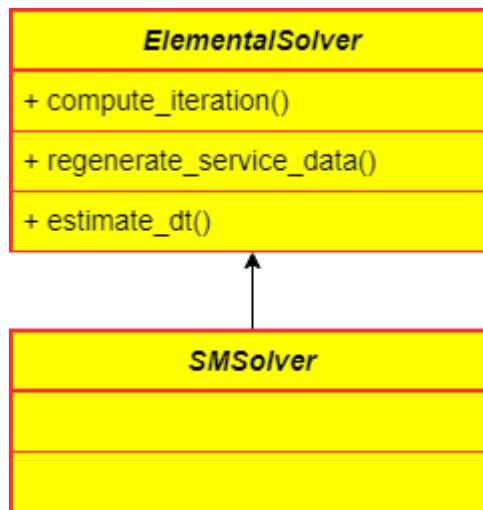


Рис. 3.5: Диаграмма UML: архитектура солвера МТДТ.

- SMSolver класс, унаследованный от базового элементарного солвера, предназначенный для решения уравнений МТДТ.
- ElementalSolver базовый класс для всех элементарных солверов, отвечающих за решение какого-либо уравнения или системы уравнений.

На рисунке 3.6 представлены функции класса SMSolver. В качестве входного параметра для разработанных солверов выступают текстовые файлы с некоторым подмножеством настроек, а именно:

- вариант используемых аппроксимаций,
- выбор критерия разрушения,
- выбор параметров для УРС.

<b><i>SMSolver</i></b>
+ compute_iteration
+ estimate_dt
+ getProp
+ confMaxwell
+ configAEOS
+ recomputeVelocity
+ recomputeDensityFlow
+ checkMarkCell
+ computeStrainRate
+ computeStrain
+ computeDeviator
+ computeTensViscosity
+ computeStresses
+ computePrincipalStresses
+ computeMisesCriterion
+ computePrincipalStresses
+ computeFractureCriterion
+ computeSpallCriterion
+ computePrincipalStresses
+ mappingCells

Рис. 3.6. Список функций класса SMSolver

- SMSolver::compute\_iteration – функция вызывается из базового класса каждую итерацию, это основная функция любого солвера;
- SMSolver::estimate\_dt – функция вычисляет шаг по времени;
- SMSolver::getProp – функция получает механические характеристики материалов из конфигурационного файла;
- SMSolver::confMaxwell – функция, которая динамически контролирует

изменение переменной агрегатного состояния и производит конфигурацию УРС;

`SMSolver::configAEOS` – функция позволяет пользователю использовать аналитический УРС;

`SMSolver::recomputeVelocity` – функция пересчета скоростей;

`SMSolver::recomputeDensityFlow` – функция пересчета потока массы;

`SMSolver::checkMarkCell` – функция проверки принадлежности ячейки к твердотельным областям;

`SMSolver::computeStrainRate` – функция вычисления тензора скоростей деформации;

`SMSolver::computeStrain` – функция вычисления тензора относительных деформации;

`SMSolver::computeDeviator` – функция вычисления тензора девиатора напряжений;

`SMSolver::computeTensViscosity` – функция вычисления тензорной вязкости;

`SMSolver::computeStresses` – функция вычисления тензора напряжений;

`SMSolver::computePrincipalStresses` - функция вычисления главных напряжений;

`SMSolver::computeMisesCriterion` - функция проверки выполнения критерия пластичности;

`SMSolver::computeFractureCriterion` – функция вычисления критерия разрушения

`SMSolver::computeSpallCriterion` – функция проверки критерия откола;

`SMSolver::mappingCells` – функция разметки ячеек в зависимости от переменной агрегатного состояния.

Для решения тестовых и прикладных задач автором разработаны и реализованы специализированные граничные условия, оформленные в виде вычислительных функций. Эти функции интегрированы в программный

комплекс MARPLE в рамках его объектно-ориентированной архитектуры.

Структура соответствующих классов, их взаимосвязи между собой и с другими компонентами MARPLE представлены на рис. 3.6. В целях наглядности на диаграмме отображены лишь ключевые классы и атрибуты, существенные для понимания логики реализации и взаимодействия модулей.

Параметры граничных условий (включая временные зависимости, физические величины и геометрические характеристики) задаются пользователем в основном конфигурационном файле USERTASK, что обеспечивает гибкость настройки без необходимости модификации исходного кода.

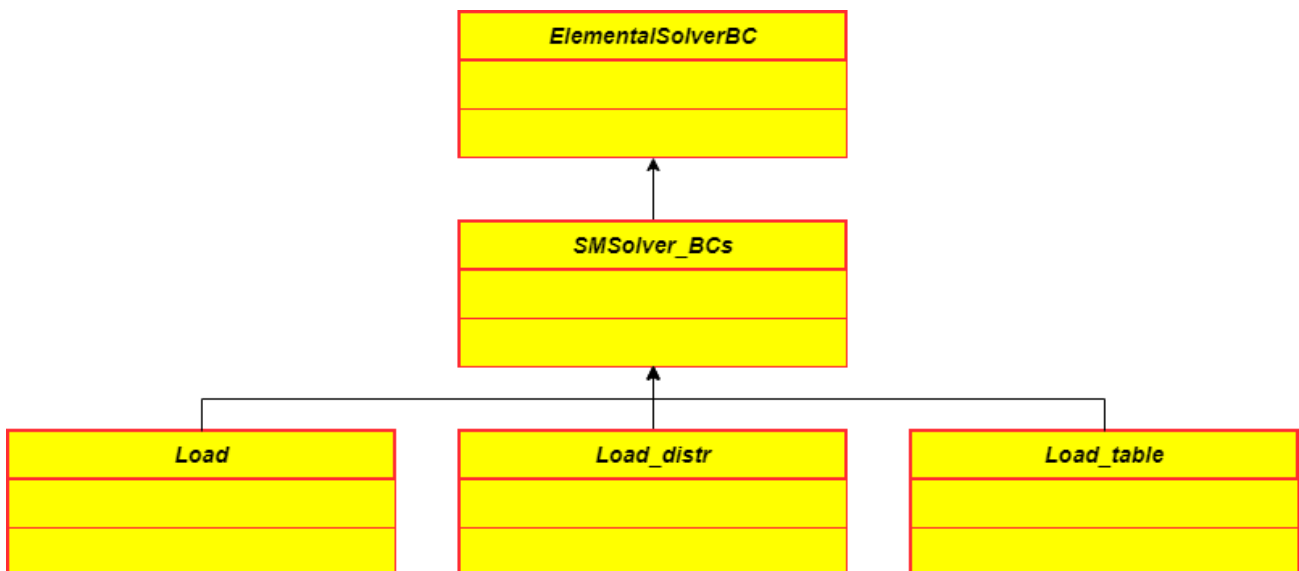


Рис. 3.6: Диаграмма UML: архитектура граничных условий для солвера МТДТ.

SMSolver\_BCs базовый класс для всех граничных условий, предназначенных для солверов МТДТ; все новые граничные условия должны быть унаследованы от этого класса.

- SMSolver\_BCs::Load класс для граничного условия нагрузка  $P(t)$  в виде зависимости давления от времени;
- SMSolver\_BCs::Load\_distr класс для задания нагрузки аналитическим способом в виде функции  $F(x,y,z,t)$ ;
- SMSolver\_BCs::Load\_table специальный класс граничных и начальных

условий энерговклада в табличном виде  $Qs(x,y,z,t)$ .

Солвер для совместного моделирования газо- и гидродинамических процессов с учётом упругопластического поведения твёрдого тела разработан с ориентацией на архитектуру высокопроизводительных распределённых вычислительных систем. Он полностью интегрирован в вычислительную платформу MARPLE и использует весь доступный функционал комплекса — от работы с гибридными нерегулярными сетками и параллельной декомпозиции до механизмов динамической конфигурации физических моделей и граничных условий.

### **3.1.11. Параллельные вычисления**

Решение мультифизических задач сопряжено с необходимостью обработки большого числа физических переменных в каждом узле расчётной сетки на каждом временном шаге. Моделирование реальных трёхмерных устройств и многомасштабных процессов требует использования сеток, насчитывающих миллионы, а зачастую и сотни миллионов ячеек. Такие вычислительные задачи принципиально выполнимы только в условиях распределённых вычислений.

Программный комплекс MARPLE поддерживает выполнение на системах как с общей, так и с распределённой памятью посредством стандарта MPI. Параллелизм реализуется на основе геометрической декомпозиции расчётной области и соответствующей разбивки сетки между вычислительными узлами. Для обеспечения балансировки нагрузки применяются библиотеки METIS/ParMETIS [84], которые позволяют эффективно распределять сеточные подобласти с учётом топологии графа и объёма вычислений.

Архитектура кода оптимизирована для работы в режиме распределённой памяти и адаптирована к современным высокопроизводительным вычислительным системам, что обеспечивает

масштабируемость и эффективное использование ресурсов при решении задач промышленного масштаба.

### **3.2 Цифровая платформа KDT**

При проведении численных экспериментов, описанных в настоящей работе, возникла необходимость в инструменте, позволяющем эффективно управлять расчётами на суперкомпьютере при минимальных требованиях к клиентскому оборудованию и программной среде пользователя. Для решения этой задачи была задействована цифровая платформа KDT — веб-ориентированная система, построенная на современных веб-технологиях [88, 89].

Отказ от традиционного подхода, предполагающего установку специализированного ПО на рабочую станцию исследователя, позволил устранить ряд практических ограничений: зависимость от операционной системы, нехватку вычислительных ресурсов на клиенте, сложность синхронизации версий программного обеспечения. В архитектуре KDT вся ресурсоёмкая часть — от подготовки данных до визуализации — выполняется на стороне сервера, а пользователь взаимодействует с системой исключительно через веб-браузер.

Анализ существующих решений показал, что большинство доступных платформ либо слишком узкоспециализированы (веб-лаборатории [90, 91]), либо, напротив, предоставляют гибкость за счёт усложнения интерфейса и ограничения возможностей визуализации (системы типа [92, 93]). Платформа KDT, напротив, сочетает гибкость интеграции прикладных программ с удобством графического управления, что оказалось критически важным для постановки и анализа мультифизических задач.

В ходе исследования были задействованы следующие функциональные возможности платформы:

- выполнение расчётов на удалённых вычислительных ресурсах через защищённое SSH-соединение;
- централизованное хранение метаданных (название задачи, описание, параметры, пути к файлам) в реляционной базе данных;
- автоматизация типовых последовательностей операций (например, генерация сетки → декомпозиция → запуск солвера) с помощью сценариев;
- многопользовательский режим с разграничением прав: расчётчики могут запускать и отслеживать задачи, разработчики — регистрировать новые приложения, администраторы — управлять инфраструктурой.

Безопасность обеспечивается за счёт размещения вычислительных узлов и веб-сервера во внутренней сети, при этом внешний доступ ограничен единственным открытым портом с шифрованием по протоколу HTTPS. Пользователи не имеют прямого доступа к кластеру — все операции опосредованы через строго типизированные запросы к API, что минимизирует риски несанкционированного вмешательства.

Важным практическим результатом стало сокращение порога входа для исследователей: вместо работы с командной строкой, файловыми системами и системами управления заданиями (например, Slurm) пользователь взаимодействует с единым графическим интерфейсом, в котором последовательно задаются параметры расчёта, отслеживается прогресс и анализируются результаты. При этом разработчики прикладных модулей (включая автора) получили возможность оперативно обновлять код, мгновенно распространяя изменения на всех пользователей без необходимости локальной переустановки ПО.

Таким образом, платформа KDT сыграла ключевую роль в организации эффективного, безопасного и масштабируемого вычислительного

эксперимента, соответствующего современным требованиям к цифровой научной инфраструктуре.

### **3.3 Рабочая версия цифровой платформы KDT**

В ходе диссертационного исследования был применён рабочий прототип цифровой платформы, реализующий ключевые архитектурные концепции и подходы, описанные в настоящей главе.

Платформа функционирует как веб-сервер, который при обращении по корневому адресу передаёт клиенту HTML-разметку, CSS-стили и JavaScript-скрипты, необходимые для формирования интерактивного графического интерфейса непосредственно в браузере пользователя. Взаимодействие с элементами интерфейса инициирует отправку запросов на серверную часть — как по стандартным протоколам HTTP/HTTPS, так и через WebSocket для операций, требующих двунаправленного обмена данными в реальном времени.

Сервер обрабатывает запросы в зависимости от их типа: при необходимости получения метаинформации (например, списка расчётов или статусов задач) данные извлекаются из локальной базы; для операций, связанных с вычислительной инфраструктурой (запуск, мониторинг, управление), сервер устанавливает SSH-соединение с удалённым вычислительным ресурсом и выполняет соответствующие команды в его среде.

Полученные результаты возвращаются в браузер пользователя, обеспечивая прозрачное и удобное взаимодействие с расчётной инфраструктурой без прямого доступа к вычислительным узлам. Таким образом, прототип позволил автору эффективно управлять численными экспериментами, фокусируясь на содержательной стороне моделирования, а не на технических аспектах работы с кластером.

### 3.4.1. Структура данных в цифровой платформе

Рабочая версия цифровой платформы опирается на реляционную базу данных, спроектированную с учётом минимальной достаточности: в неё включены только те таблицы, которые необходимы для реализации заявленного функционала управления расчётами, ресурсами и приложениями.

Основные сущности базы данных и их назначение:

- **Resource** — содержит описание удалённых вычислительных ресурсов: IP-адрес, порт SSH-сервера, тип системы управления заданиями (например, Slurm, PBS), а также поддерживаемые возможности настройки переменных окружения. Подключение к ресурсу осуществляется с использованием RSA-ключа, принадлежащего веб-серверу платформы.
- **Access** — обеспечивает разграничение прав доступа: связывает учётные записи пользователей с конкретными вычислительными ресурсами, задаёт дополнительные переменные окружения и фиксирует, какие версии приложений разрешено использовать данному пользователю на данном ресурсе.
- **Application** — хранит метаданные о прикладных программах, включая краткое описание и шаблонный метафайл в формате YAML. Этот файл определяет параметры сборки, команду запуска, а также структуру входных и выходных данных, необходимую для автоматической генерации пользовательского интерфейса.
- **AppVersion** — реализует версионирование приложений: для каждой версии сохраняется путь к исходному коду и финальная версия метафайла, используемая при построении интерфейса.
- **Scenario** — описывает последовательность запуска нескольких приложений как единого вычислительного процесса. Сценарий задаётся YAML-файлом строгой структуры, в котором определены зависимости

между выходными данными одного приложения и входными параметрами другого.

- ScenVersion — обеспечивает версионирование сценариев; содержит итоговое метаописание, на основе которого формируется интерактивный интерфейс для настройки расчёта.
- Project — носит исключительно информационный характер и служит для логического объединения связанных расчётов в рамках одного исследовательского проекта.
- Calculation — центральная сущность, через которую осуществляется взаимодействие с вычислительной инфраструктурой. При создании расчёта указываются конкретный сценарий и его версия; на основе этой информации платформа автоматически генерирует веб-интерфейс для ввода исходных данных, управления заданием и получения результатов с удалённого узла.

Такая структура базы данных обеспечивает гибкость, масштабируемость и полную автоматизацию процесса подготовки и запуска расчётов, при этом сохраняя прозрачность и удобство для конечного пользователя.

### **3.4.2. Организация клиент-серверного взаимодействия**

В ходе исследования использовалась цифровая платформа, доступ к которой осуществлялся через графический веб-интерфейс. Взаимодействие пользователя с системой реализовано посредством отправки HTTP- и WebSocket-запросов на заранее определённые конечные точки сервера:

- /auth/ — проверка активности текущей сессии;
- /auth/login/, /auth/logout/, /auth/register/ — операции управления учётной записью;
- /files/, /files/ssh/ — получение файлов с локального сервера или с удалённого вычислительного узла по SSH;

- `/files/tmp/` — загрузка пользовательских файлов во временное хранилище;
- `/api/` — основной канал двунаправленного обмена данными через WebSocket;
- `/terminal/` — установка WebSocket-соединения с одновременным открытием SSH-сессии к выбранному вычислительному ресурсу.

Центральным элементом клиент-серверного взаимодействия является WebSocket-соединение по адресу `/api/`. Каждое сообщение, отправляемое клиентом, содержит обязательное поле `url`, определяющее тип операции, и, при необходимости, поле `data` с дополнительными параметрами. Серверный ответ включает поля `url`, `body` и числовой `status`. Наличие поля `url` в ответе обусловлено асинхронной природой WebSocket: клиент не получает ответ напрямую, а ожидает входящие сообщения и на их основе вызывает соответствующий обработчик. Архитектура поддерживает как однократные обработчики (например, для получения списка задач), так и постоянные подписки (для отслеживания прогресса расчёта или получения уведомлений).

Серверная часть платформы построена на основе Node.js и использует многопроцессную модель масштабирования. Основной процесс отвечает за фоновый мониторинг состояния вычислительных ресурсов и активных расчётов, в то время как дочерние процессы обрабатывают пользовательские запросы и управляют активными WebSocket-соединениями, обеспечивая изоляцию и стабильность при высокой нагрузке.

### **3.4.3. Пользовательский веб-интерфейс**

Доступ к цифровой платформе осуществлялся через стандартный веб-браузер по корневому URL-адресу. При первом обращении пользователь попадал на страницу авторизации (рис. 3.7).

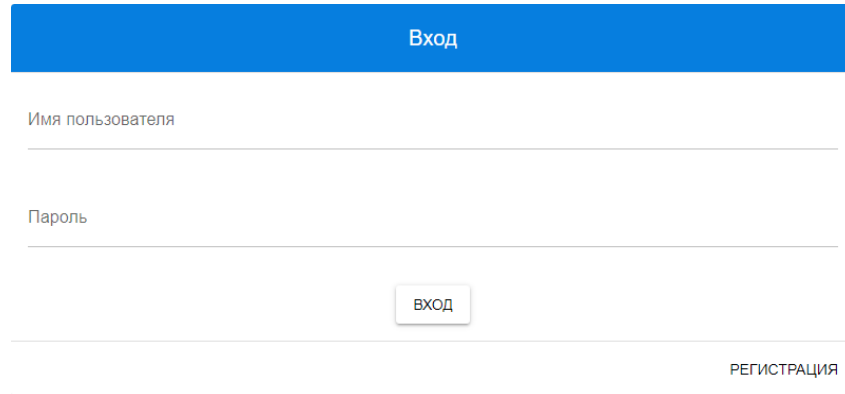


Рис. 3.7 – Форма авторизации

Первоначальная регистрация требовала уникального ключа доступа, выдаваемого администратором и определяющего тип учётной записи. После успешной аутентификации интерфейс динамически адаптировался под роль пользователя: расчётчик, разработчик или администратор — каждая из которых имела свой набор инструментов и прав доступа.

Администратор отвечал за настройку вычислительной инфраструктуры. На странице «Вычислители» (рис. 3.8) он регистрировал новые ресурсы, указывая их имя, IP-адрес, порт SSH-сервера, тип системы управления заданиями («native» или «СУППЗ») и базовые переменные окружения. После сохранения записи становилась доступна настройка пользовательского доступа: задавались имя учётной записи на удалённой машине, рабочая директория и дополнительные переменные.

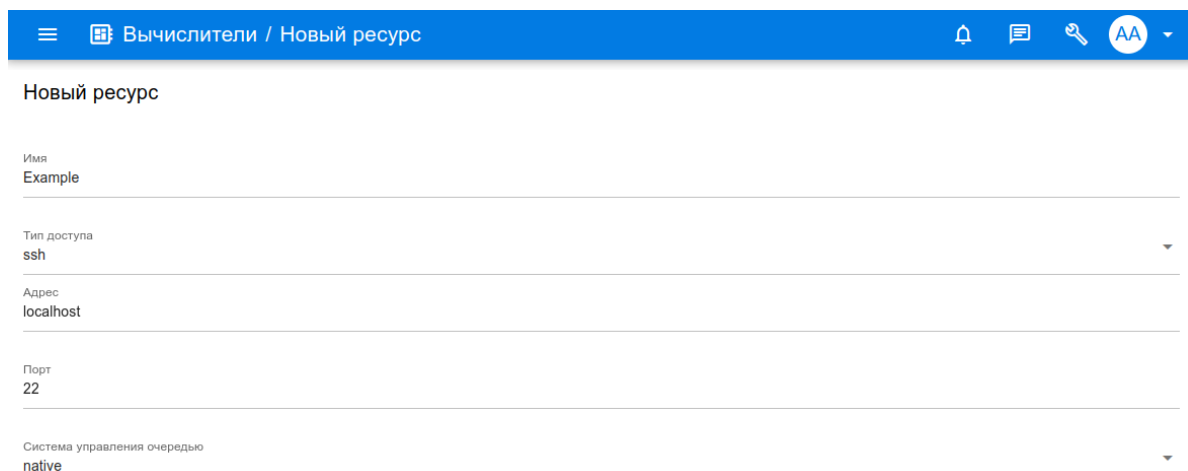


Рис. 3.8 – Форма регистрации нового вычислительного ресурса

Авторизация на вычислителе выполнялась с использованием RSA-ключа веб-сервера, предварительно размещённого в файле `authorized_keys` удалённой системы. Успешное подключение фиксировалось в базе данных записью типа «Access» и отображалось на странице ресурса (рис. 3.9), где также была доступна функция встроенного SSH-терминала.

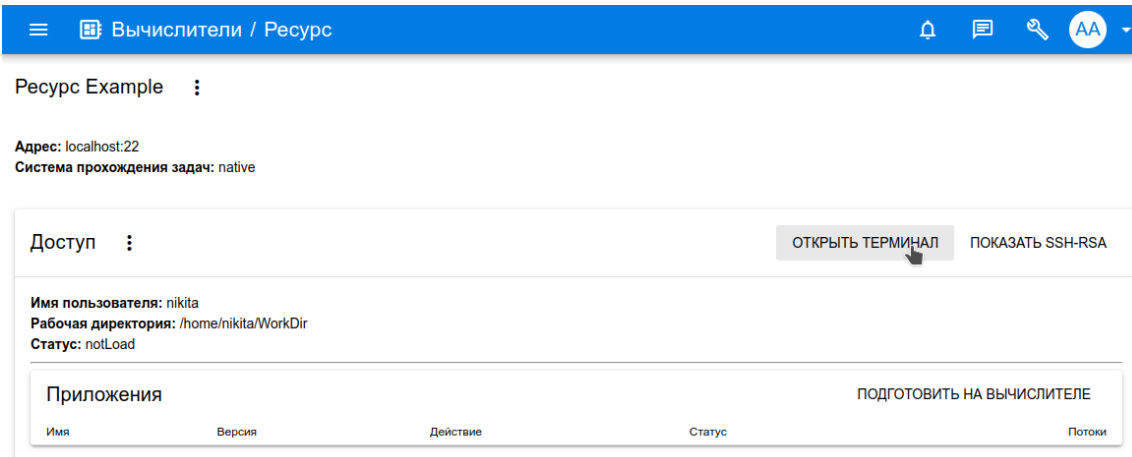


Рис. 3.9 – Страница вычислительного ресурса

Кроме того, администратор имел доступ к специальному интерфейсу для прямой работы с данными платформы — просмотра, редактирования и удаления записей в базе (рис. 3.10).

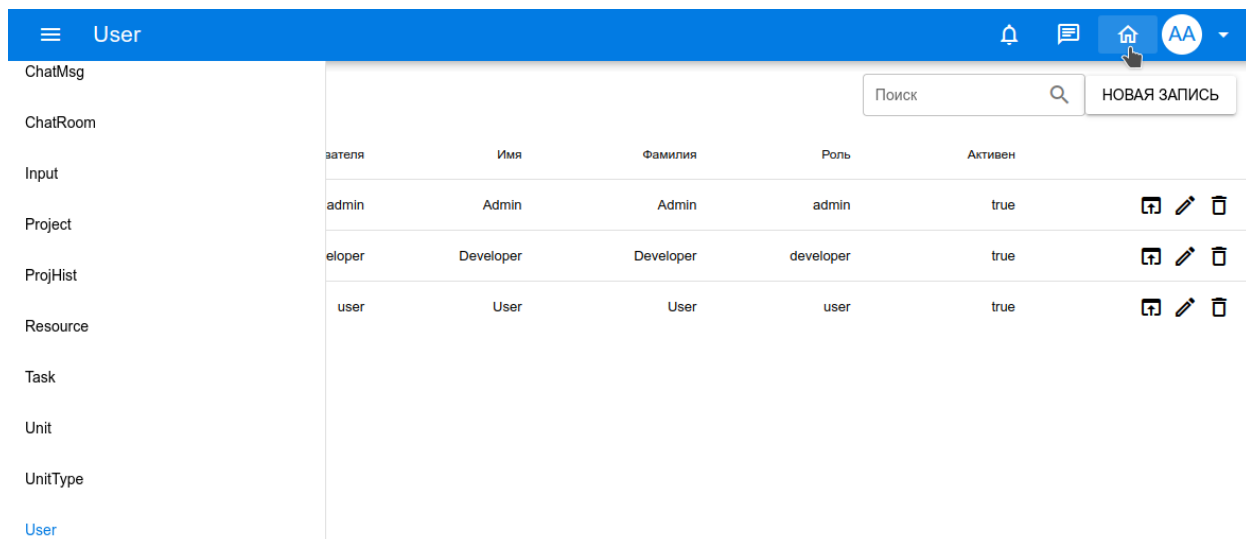


Рис. 3.10 – Интерфейс доступа

Разработчики прикладных программ регистрировали приложения и сценарии. При создании приложения (рис. 3.11) указывались его название, уникальный идентификатор, описание (в формате Markdown) и шаблон паспорта — YAML-файл, описывающий сборку, запуск и структуру входных/выходных параметров.

Рисунок 3.11 – Форма создания приложения

Версии приложений (рис. 3.12) включали путь к исходному коду и актуальный паспорт. После регистрации приложение можно было «подготовить» на одном или нескольких вычислителях: система автоматически передавала код, собирала исполняемый файл и отображала статус операции (рис. 3.13).

```

1 - build:
2   mkdir build; cd build; cmake ../; make -j4
3 - exec:
4   comm: build/solver config.json
5 - runBy:
6   type: exec
7 - inputs:
8   - type: file
9     id: mesh
10    name: Mesh file
11    descr: Mesh file in inner format
12    options:
13      format: data
14      path: mesh.txt
15   - type: file
16     id: jsoncfg
17     name: Configuration
18     descr: Configuration file in json format
19     options:
20       format: tabs
21       vertical: true
22       fType: json
23       path: config1.json
24     childs:
25     - type: category
  
```

Рис. 3.12 – Форма версии приложения

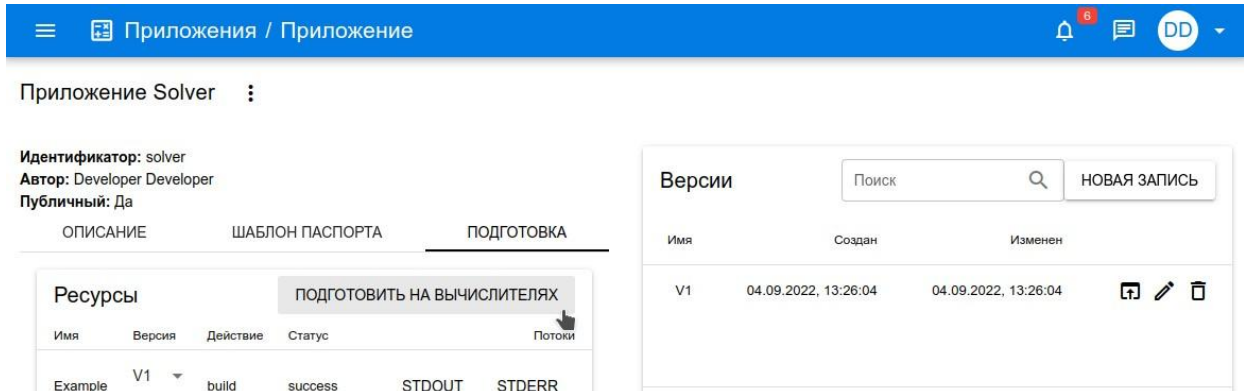


Рис. 3.13 – Страница приложения. Подготовка на удаленном вычислительном ресурсе

Сценарии задавали последовательность запуска приложений с явным указанием связей между выходными данными одного компонента и входными параметрами другого. Их версии также описывались в формате YAML и проходили валидацию на корректность структуры и существование ссылок на зарегистрированные приложения. Перед сохранением разработчик мог протестировать сценарий с помощью функции предварительного просмотра.

Расчётчики использовали платформу для проведения вычислительных экспериментов. Сначала создавался проект — логическая группа расчётов с указанием названия, описания и списка участников (рис. 3.14). В рамках проекта инициировался расчёт (рис. 3.15): выбирался сценарий и его версия, после чего система автоматически генерировала интерфейс ввода параметров на основе паспорта приложения. Пользователь мог задавать числовые и строковые значения, загружать файлы или ссылаться на результаты ранее выполненных задач.

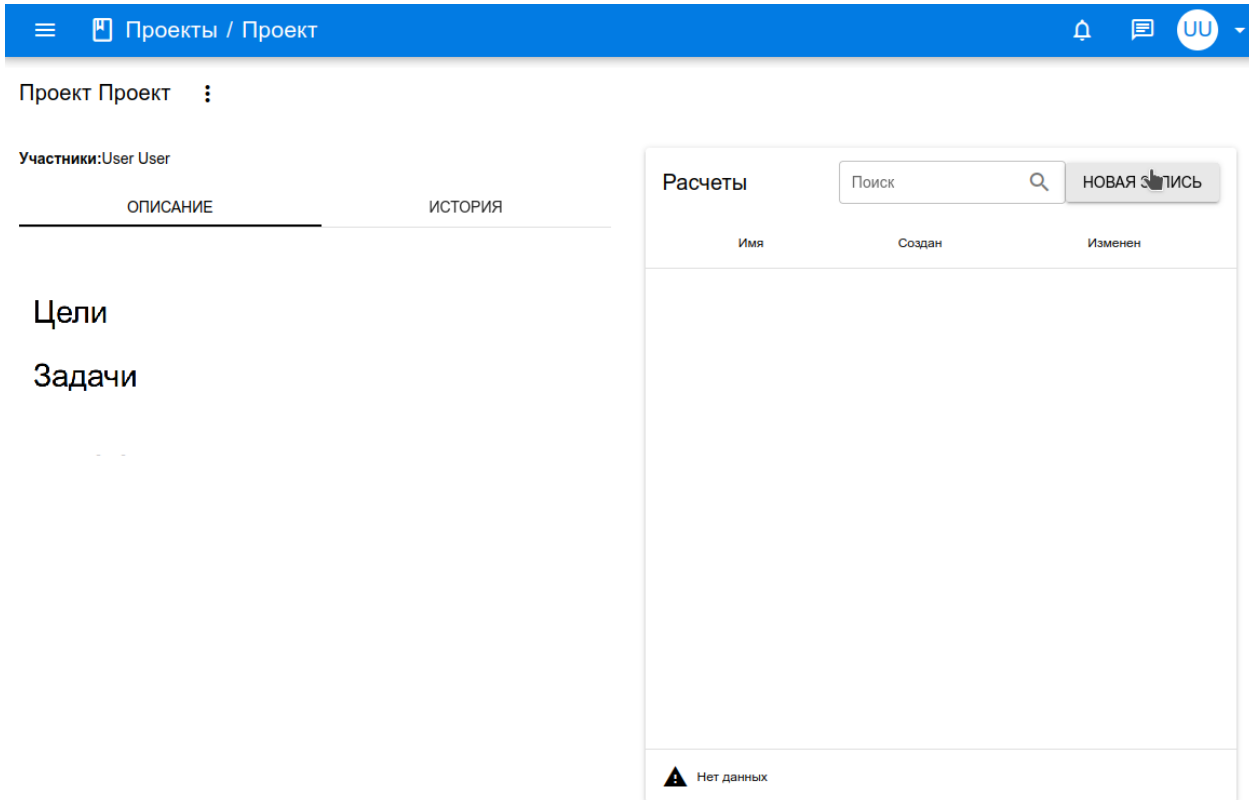


Рисунок 3.14 – Страница проекта

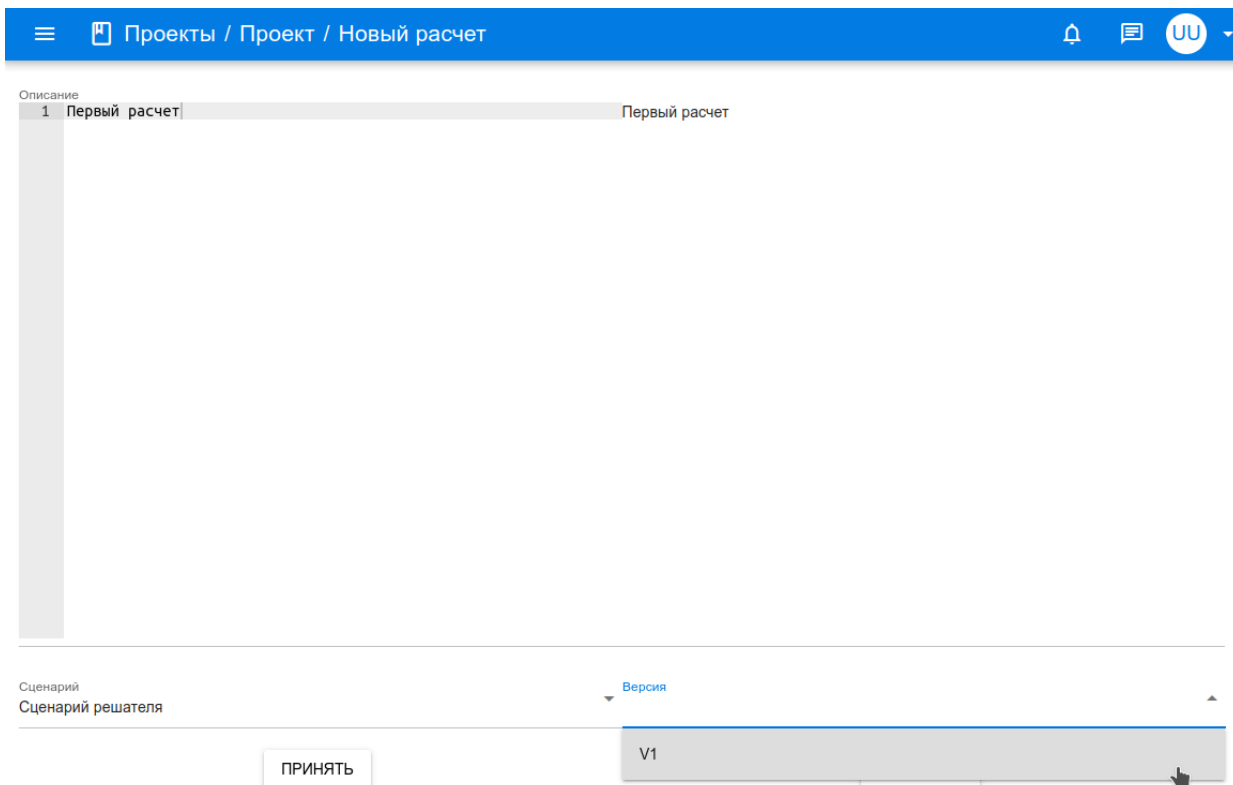


Рисунок 3.15 – Форма создания расчета

Запуск осуществлялся на вкладке «Запуск», где отображались параметры выполнения (например, число MPI-процессов), этапы расчёта и элементы управления (старт, останов). Статус задачи обновлялся в реальном времени, а содержимое стандартных потоков вывода и ошибок было доступно по кнопкам «Stdout» и «Stderr».

Анализ результатов проводился на вкладке «Выходные данные», где файлы отображались в виде древовидной структуры. В зависимости от типа данных система предлагала соответствующие средства просмотра:

- текстовые файлы — встроенного редактора,
- изображения и видео — нативного отображения в браузере,
- VTK-файлы — интерактивного визуализатора на основе Visualizer.js (рис. 3.16).

Поддерживались также операции скачивания и очистки данных.

Таким образом, платформа обеспечила сквозной цикл суперкомпьютерного эксперимента — от постановки задачи до анализа результатов — без необходимости прямого взаимодействия с командной строкой или глубокого знания архитектуры целевых вычислительных систем.

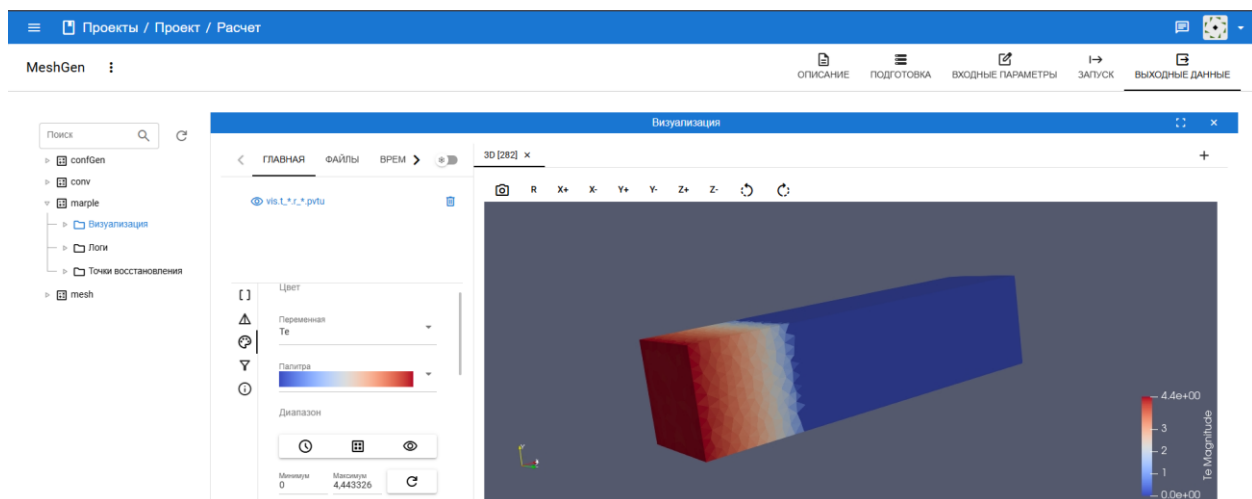


Рис. 3.16 – Просмотр визуализации

### 3.4 Интеграция MARPLE & KDT

Основной технической сложностью при интеграции программного комплекса MARPLE с цифровой платформой KDT (KIAM Digital Tool) стала несовместимость форматов конфигурационных данных. MARPLE изначально использует собственный текстовый формат конфигурационных файлов, не основанный на общепринятых стандартах, таких как JSON [94]. В то же время архитектура KDT предполагает описание параметров приложений именно в формате JSON — в рамках так называемого паспорта приложения, на основе которого автоматически генерируется универсальный графический интерфейс.

На начальном этапе рассматривались варианты модификации исходного кода MARPLE с целью добавления поддержки JSON. Однако такой подход потребовал бы значительных усилий со стороны разработчиков комплекса, включая рефакторинг парсера конфигураций, тестирование и согласование изменений с существующей архитектурой. Учитывая ограниченные ресурсы и необходимость быстрой интеграции, от этого пути отказались.

Вместо этого было принято решение разработать автономную конвертирующую утилиту, выполняющую трансляцию JSON-описания из паспорта приложения в нативный формат конфигурационных файлов MARPLE. Эта утилита была интегрирована в рабочий процесс платформы KDT как промежуточный этап: после того как пользователь задаёт параметры расчёта через веб-интерфейс, система формирует JSON-файл, который передаётся утилите; на выходе получается набор конфигурационных файлов, полностью совместимых с MARPLE.

Такой подход позволил сохранить целостность кодовой базы MARPLE, обеспечить гибкость настройки через KDT и реализовать интеграцию без вмешательства в ядро существующего комплекса.

### 3.4.1. Утилита преобразования конфигурационных данных

В рамках интеграции платформ KIAM Digital Tool (KDT) и MARPLE была разработана специализированная утилита JsonProcessor, предназначенная для преобразования конфигурационных данных из формата JSON (используемого в KDT) в нативный текстовый формат USERTASK, принятый в MARPLE. До её появления прямое взаимодействие между системами было невозможно из-за несовместимости форматов (см. рис. 3.17).

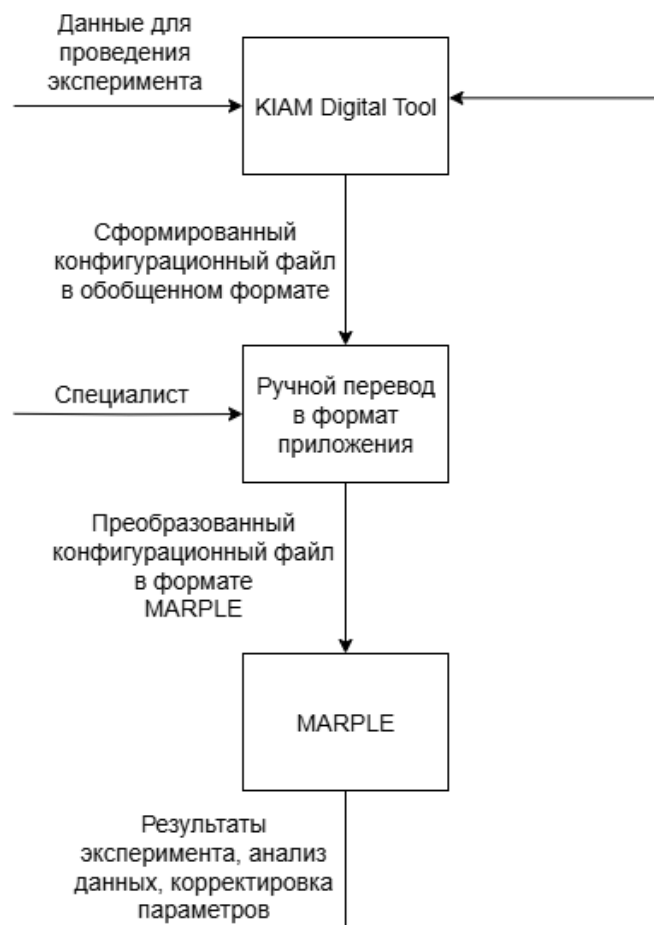


Рис. 3.17 Диаграмма, демонстрирующая, как выглядит взаимодействие KDT и MARPLE без JsonProcessor

Для реализации парсинга JSON была выбрана библиотека nlohmann/json [95] — современное, заголовочное (header-only) решение, не требующее внешних зависимостей и совместимое со стандартами C++11 и выше. Её применение

позволило минимизировать накладные расходы на сборку и обеспечить высокую читаемость кода.

Архитектура утилиты спроектирована в соответствии с принципами объектно-ориентированного программирования и рекомендациями SOLID [96]. Центральную роль играет класс `JsonProcessor`, реализующий паттерн Фасад [97]. Он предоставляет единый точечный интерфейс для запуска всего процесса преобразования, скрывая внутреннюю сложность взаимодействия подсистем (см. рис. 3.18).

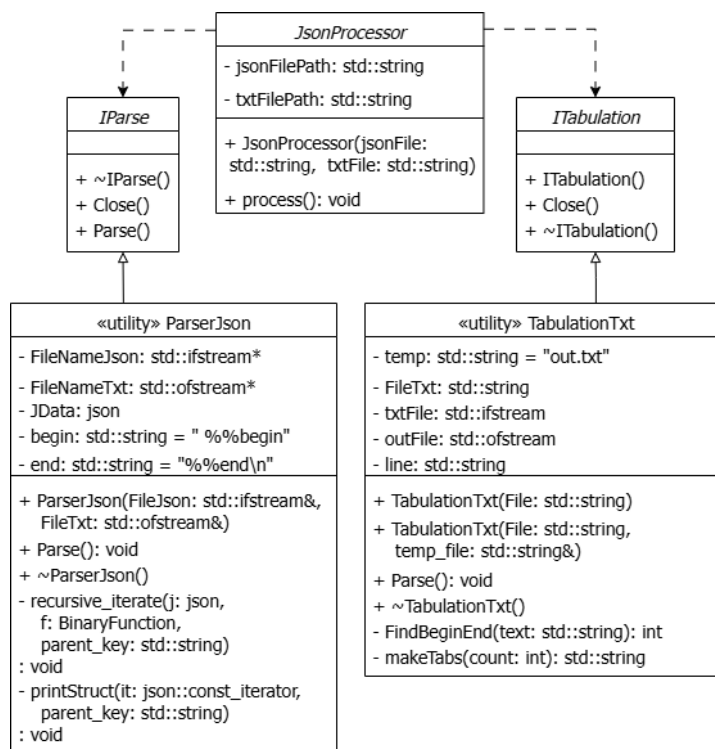


Рис. 3.18. UML диаграмма классов утилиты `JsonProcessor`

Фасад последовательно координирует два этапа обработки:

1. Парсинг входного JSON-файла с помощью класса `ParserJson`, который инкапсулирует работу с библиотекой `nlohmann::json` и выполняет десериализацию данных независимо от их конкретной структуры;
2. Форматирование результата в читаемый текстовый вид с помощью класса `TabulationTxt`, добавляющего отступы и структурируя вывод в соответствии с требованиями формата `USERTASK`.

Ключевым архитектурным решением стало введение интерфейсов IParse и ITabulation, через которые JsonProcessor взаимодействует с подсистемами. Это позволило реализовать принцип инверсии зависимостей (DIP): фасад зависит не от конкретных реализаций, а от абстракций. В результате система стала:

- открытой для расширения (принцип OCP) — новые форматы или методы обработки можно добавлять без изменения ядра;
- закрытой для модификации — логика фасада остаётся неизменной при изменении деталей парсинга или форматирования;
- соответствующей принципу разделения интерфейсов (ISP) — каждый интерфейс содержит только необходимый минимум методов.

Таким образом, утилита JsonProcessor обеспечивает надёжную и гибкую передачу конфигурационных данных между KDT и MARPLE, сохраняя целостность информации и адаптируя её к требованиям целевой платформы (см. рис. 3.19). При этом архитектура утилиты позволяет легко адаптировать её под будущие изменения в форматах или требованиях к обработке данных.

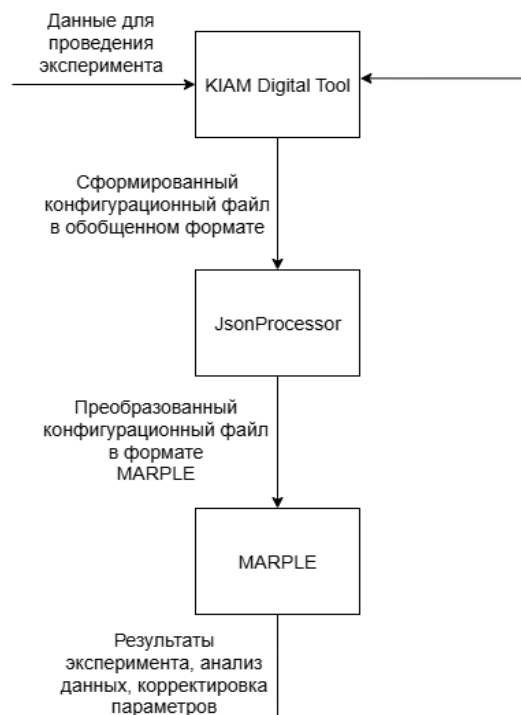


Рис. 3.19. Диаграмма, демонстрирующая, как стало выглядеть взаимодействие систем KDT и MARPLE3D.

### 3.4.2. Схема взаимодействия приложений

Разработанная цифровая платформа реализована в виде клиент– серверной системы, поддерживающей динамическую интеграцию удалённых вычислительных ресурсов и проблемно– ориентированных приложений для проведения расчётов на суперкомпьютерных комплексах. Серверная часть системы построена с использованием фреймворка NestJS, обеспечивающего маршрутизацию, управление сеансами и взаимодействие с реляционной базой данных, и функционирует в среде Node.js. Архитектура взаимодействия сервера веб– лаборатории представлена на рис. 3.20.

Клиентская часть системы реализована как одностраничное веб-приложение (SPA) с использованием реактивного фреймворка Vue.js. При инициализации сеанса через веб-браузер пользователю предоставляются HTML/CSS-макеты и JS-скрипты для отображения интерфейса. Дополнительные данные из базы извлекаются через постоянное веб-сокет-соединение, устанавливаемое после прохождения процедуры аутентификации.

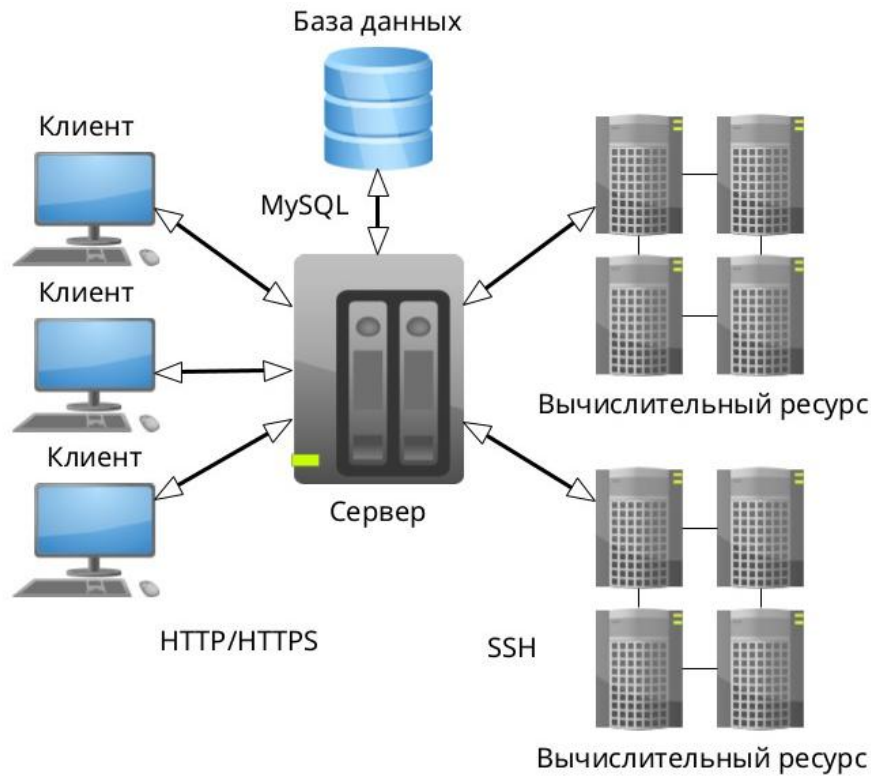


Рис. 3.20. Схема взаимодействия цифровой платформы

### 3.4.3. Организация доступа и управления ресурсами

Для обеспечения контролируемого доступа к системе реализован механизм регистрации с использованием уникального ключа, выделяемого администратором. На основе ключа формируются роли пользователей:

- Расчётчик — выполняет вычислительные эксперименты;
- Разработчик ПО — интегрирует приложения в систему;
- Администратор — управляет базой данных и регистрирует вычислительные ресурсы.

После регистрации в системе создаются записи о связях пользователя с вычислительными ресурсами, включая рабочие директории, имена пользователей и генерируемый SSH–RSA–ключ для авторизации на удалённых узлах. Взаимодействие с ресурсами осуществляется через протокол SSH с передачей команд и данных файловой системы.

### 3.4.4. Интеграция приложений

Интеграция проблемно-ориентированных приложений реализуется через создание сущности «Приложение», описываемой следующими атрибутами:

- Название (отображается в интерфейсе);
- Идентификатор (используется в сценариях);
- Список разработчиков.

Исходный код хранится в репозитории Git и инициализируется одним из способов:

- Пустой каталог;
- Архив, загружаемый пользователем;
- Клонирование существующего репозитория.

### 3.4.5. Подготовка приложений на удалённых ресурсах

Перед использованием приложения необходимо подготовить его на удалённых вычислительных ресурсах, доступных пользователю. Для этого на вкладке «Подготовка» страницы приложения (рис. 3.21) выбирается версия (git-ветвь) для целевого ресурса и активируется кнопка «Развернуть».

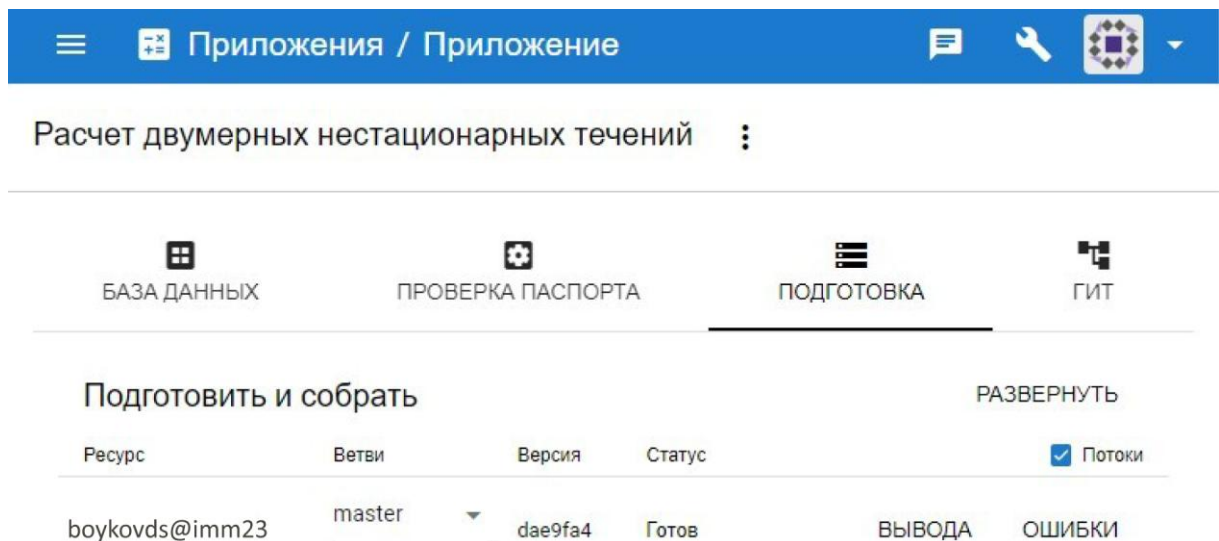


Рис. 3.21. Интерфейс подготовки приложения

Сервер веб-лаборатории передаёт исходный код указанной версии на удалённый узел в рабочую директорию и выполняет команду сборки, определённую в паспорте приложения. Статус операции отображается в реальном времени через веб– интерфейс.

### **3.4.6. Автоматизация вычислений**

Для обеспечения сквозной автоматизации жизненного цикла прикладной программы — от сборки до анализа результатов — каждое приложение в платформе должно сопровождаться метаописанием в виде файла `passport.yaml`. Этот файл содержит структурированное описание:

- команды сборки исходного кода;
- иерархии входных параметров (в виде дерева);
- списка ожидаемых выходных данных;
- конфигурационных зависимостей между компонентами.

На основе этих данных платформа автоматически:

- выполняет компиляцию кода на выбранном удалённом вычислительном ресурсе;
- генерирует графический веб-интерфейс для задания параметров;
- отслеживает ход выполнения расчёта;
- предоставляет доступ к результатам по завершении.

Пример структуры файла `passport.yaml` приведён на рис. 3.22.

Для объединения нескольких приложений в единый вычислительный процесс используется сущность «Сценарий». Сценарий определяет:

- последовательность запуска приложений;
- связи между ними через передачу выходных данных одного компонента во входные параметры другого.

Процедура создания сценария включает:

1. Указание названия и списка ответственных разработчиков;

2. Инициализацию репозитория версий;
3. Формирование файла `script.yaml`, в котором задаются:
  - идентификаторы используемых приложений;
  - правила передачи данных между этапами;
  - логическая последовательность исполнения.

Такое формализованное описание позволяет системе динамически генерировать унифицированный пользовательский интерфейс для настройки и запуска сложных вычислительных экспериментов. Пример метаописания и соответствующего интерфейса показан на рис. 3.22.

15	<code>inputs:</code>	
23	- <code>ident: common</code>	
26	<code>children:</code>	Алгоритм генерации 2D
27	- <code>ident: meshType</code>	<b>Automatic</b>
30	<code>options:</code>	
36	<code>label: Объемная</code>	
37	- <code>ident: meshAlgo2D</code>	Алгоритм генерации 3D
38	<code>name: Алгоритм генерации 2D</code>	<b>Delaunay</b>
39	<code>type: field</code>	
40	<code>options:</code>	
41	<code>format: select</code>	
42	<code>options:</code>	
43	- <code>value: MeshAdapt</code>	Максимальный линейный размер
44	<code>label: MeshAdapt</code>	<b>0,1</b>
45	- <code>value: Automatic</code>	
46	<code>label: Automatic</code>	
47	- <code>value: Delaunay</code>	
48	<code>label: Delaunay</code>	
49	- <code>value: Frontal</code>	Минимальный линейный размер
50	<code>label: Frontal</code>	<b>0,000001</b>
51	- <code>value: BAMG</code>	
52	<code>label: BAMG</code>	
53	- <code>value: DelQuad</code>	
54	<code>label: DelQuad</code>	
55	<code>default: Automatic</code>	Количество трздов
56	- <code>ident: meshAlgo3D</code>	<b>1</b>
57	<code>name: Алгоритм генерации 3D</code>	

Рис. 3.22. Фрагмент паспорта приложения (слева) и пример сгенерированного на его основе веб–интерфейса (справа)

В рамках настоящего исследования был реализован вычислительный эксперимент, построенный на взаимодействии следующих специализированных

приложений (рис. 3.23):

- mesh (meshgen) — генерация расчётной сетки в формате Gmsh;
- conv — преобразование сетки из формата Gmsh в нативный формат MARPLE;
- confGen — трансляция конфигурационных данных из JSON в формат USERTASK;
- marple — запуск решателя MARPLE-3D для численного моделирования и последующей визуализации.



Рис. 3.23. Схема взаимодействия приложений

На этапе настройки эксперимента (вкладка «Входные параметры») система автоматически формирует иерархическое дерево форм (рис. 3.24) на основе паспортов всех приложений, включённых в сценарий. Через этот интерфейс пользователь задаёт начальные условия, геометрические параметры и конфигурационные данные для каждого этапа вычислительного процесса — до фактического запуска расчёта.

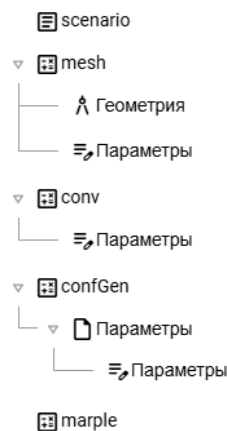


Рис. 3.24. Дерево форм

Таким образом, комбинация стандартизированных паспортов и сценариев обеспечивает полную автоматизацию подготовки, выполнения и анализа мультиэтапных суперкомпьютерных экспериментов без ручного вмешательства в файловую систему или командную строку.

### **3.5 Выводы по Главе 3**

Создано новое программное обеспечение, позволяющее проводить массовые вычислительные эксперименты в области исследования свойств материалов при интенсивных энергетических воздействиях.

Разработанный алгоритм согласованного решения задач гидродинамики и упругопластики реализован на основе объектно-ориентированного проектирования и программирования с использованием языка C++ (стандарт C++ 14 / C++ 17) и библиотеки OpenMPI в виде предметно-ориентированной версии кода, включенной в состав вычислительной платформы MARPLE. Для этой цели разработана иерархия классов солвера механики твердого деформируемого тела и соответствующих граничных условий, а также ряд вспомогательных программных модулей.

Вычислительная платформа MARPLE интегрирована в цифровую платформу для решения сложных мультифизических задач KIAM Digital Tool. Разработана необходимая для этого утилита преобразования конфигурационных данных. Спроектирован и реализован графический пользовательский интерфейс расчетных кодов, предоставлены и документированы типичные сценарии использования цифровой платформы для каждого из типов пользовательского аккаунта.

Результаты данной главы опубликованы в работах:

6. MARPLE: SOFTWARE FOR MULTIPHYSICS MODELLING IN CONTINUOUS MEDIA / Gasilov V.A., Boldarev A.S., Olkhovskaya O.G., Boykov D.S., Sharova Yu.S., Savenko N.O., Kotelnikov A.M. // Numerical Methods and Programming. 2023. Т. 24. № 4. С. 316-338.

7. MARPLE: ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ МУЛЬТИФИЗИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЗАДАЧАХ СПЛОШНЫХ СРЕД / Гасилов В.А., Болдарев А.С., Ольховская О.Г., Бойков Д.С., Шарова Ю.С., Савенко Н.О., Котельников А.М. // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 37. С. 1-40.
8. СКВОЗНОЙ РАСЧЕТ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ С ДИНАМИЧЕСКИМ КОНТРОЛЕМ АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ / Бойков Д.С. // Математическое моделирование. 2024. Т. 36. № 4. С. 166-182.
9. ИНТЕГРАЦИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ПЛАТФОРМЫ MARPLE В ЦИФРОВУЮ ПЛАТФОРМУ KIAM DIGITAL TOOL ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МУЛЬТИФИЗИКИ / Бойков Д.С., Тарасов Н.И., Болдарев А.С., Кондратьев К.С. // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2025. № 45. С. 1-26.

## **ГЛАВА 4. ЛАГРАНЖЕВ КОД ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ СРАВНИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ**

Процессы хрупкого разрушения под действием импульсной нагрузки имеют волновую природу и вызваны взаимодействием проходящих по материалу прямых и отражённых волн. В случае слоистой структуры или анизотропной природы материала нагруженного объекта характер волновой картины сильно усложняется из-за наличия внутренних границ.

На данный момент не существует общей теории, позволяющей предсказывать поведение многослойных конструкций при “ударных” режимах нагружения. При высокоскоростных соударениях в большинстве случаев повреждения могут быть обнаружены даже без использования специальных средств. Однако постановка и проведение экспериментов для задач высокоскоростного или высокоэнергетического взаимодействия тел на практике представляют большую сложность ввиду высокой стоимости либо технических трудностей реализации подобных опытов. Поэтому большое практическое значение имеет моделирование задач соударения. Современные модели пластического течения дают возможность решать геометрически нелинейные задачи, учитывающие изменение конфигурации частиц тела в пространстве, то есть учитывать изменения геометрии деформируемого тела. Соответствующие численные коды верифицируются различными способами - путем сравнения с расчетных данных с теоретическими оценками, с экспериментальными данными, или сравнением данных расчетов, выполненных по различным методикам. Сравнительное моделирование по независимым методикам используется в тех случаях, когда для обоснования достоверности численных результатов сопоставление с теоретическими оценками и экспериментальными данными целесообразно подкрепить дополнительными вычислительными экспериментами. Например, такая необходимость возникает при тестировании широкодиапазонных УРС, критериев разрушения, и т.п.

В четвертой главе диссертации представлены результаты вычислительных экспериментов, полученные с использованием вспомогательного программного комплекса, разработанного, в соответствии с исходными целями исследований, для решения задач о высокоскоростном нагружении твердотельных объектов. Данный комплекс разработан для сравнительного моделирования по эйлеровой и лагранжевой методикам расчета упругопластических деформаций. Лагранжев подход используется для сравнительного моделирования, в частности, потому, что его применение обеспечивает отслеживание границ материалов в многоматериальных конструкциях, границ между различными агрегатными или фазовыми состояниями вещества. Полученные в сравнительных вычислительных экспериментах результаты использовались для тестирования, описанного в третьей главе диссертации эйлерова кода. Помимо указанного назначения лагранжев код может быть использован для решения практических задач в одно- двух- и трехмерных постановках.

Содержание данной главы диссертации включает краткое описание лагранжевого алгоритма расчета деформации многослойных конструкций при их ударном нагружении, описание алгоритма расчета откольных явлений, описание программной реализации разработанных алгоритмов на основе объектно-ориентированного и обобщенного программирования. В завершение главы приведены примеры решения тестовых задач.

#### **4.1 Сравнительный анализ результатов моделирования по эйлеровой и лагранжевой методикам**

Одним из ключевых этапов в процессе разработки и внедрения численных моделей для описания динамики деформируемых сред является верификация и валидация используемых алгоритмов. В рамках настоящего исследования для решения задачи нестационарного взаимодействия ударника с преградой были реализованы два принципиально различных подхода к дискретизации и интегрированию уравнений движения: эйлерова и лагранжева методики.

Настоящий раздел посвящён детальному сравнительному анализу полученных результатов, а также обсуждению их согласованности как критерия достоверности численного моделирования.

#### **4.1.1. Методология тестирования**

Эйлерова методика предполагает использование фиксированной вычислительной сетки, в каждой ячейке которой отслеживаются изменения физических параметров (плотности, скорости, давления, внутренней энергии) во времени. Данный подход особенно эффективен при моделировании задач с большими деформациями, перемещением границ и образованием свободных поверхностей, поскольку не требует перестройки сетки. Однако он может быть подвержен численной диффузии, особенно при наличии резких градиентов, что требует применения специализированных схем высокого порядка точности (например, TVD, WENO).

Лагранжева методика, напротив, основана на следовании за движущимися частицами среды — сетка «прилипает» к материалу и деформируется вместе с ним. Это позволяет точно отслеживать материальные границы и сохранять массу в каждой ячейке, что особенно важно при моделировании задач с локализованными эффектами разрушения. В данной работе лагранжевый код был построен на основе классической разностной схемы Уилкинса, разработанной в середине 1960-х годов для решения задач нестационарной газовой динамики и динамики упругопластических сред. Схема использует «шахматную» сетку, псевдовязкость для стабилизации решений в окрестности ударных волн и обеспечивает консервативность основных физических величин.

Важной особенностью лагранжевой реализации является применение теории пластичности Прандтля–Рейсса для описания поведения материалов за пределом упругости. Данная модель предполагает, что девиаторные компоненты тензора напряжений связаны с девиатором скорости пластической деформации пропорционально интенсивности напряжений и скорости пластического течения,

а зависимость от скорости нагружения отсутствует — что соответствует гипотезам классической теории идеальной пластичности. Уравнения Прандтля–Рейсса были интегрированы в рамках конечно-разностной схемы Уилкинса, что позволило корректно описывать как упругие, так и пластические стадии деформирования, включая локализацию повреждений и формирование зон откола.

В данной работе оба метода были реализованы с использованием консервативных схем, обеспечивающих выполнение законов сохранения массы, импульса и энергии. Оба кода были протестированы на наборе эталонных задач и их результаты сравнивались с экспериментальными данными.

#### **4.1.2. Анализ согласованности результатов**

На рисунке 4.1 представлены результаты моделирования процесса воздействия РЭП на преграду, полученные с использованием лагранжевой (слева) и эйлеровой (справа) методик. На обоих изображениях чётко прослеживаются две характерные зоны:

- Откол — область отрыва слоя материала от тыльной поверхности преграды, вызванная отражением разрежающей волны.
- Объёмное разрушение — локализованная зона интенсивного повреждения внутри объёма, связанная с концентрацией напряжений и развитием микротрещин.

Анализ показывает, что:

- Геометрия и пространственная локализация областей откола и объёмного разрушения практически идентичны в обоих расчётах. Положение границы отколовшейся зоны совпадает с точностью 10%.
- Форма зон повреждения также демонстрируют высокую степень соответствия.

- Динамика развития процесса (по временным срезам, не показанным здесь) также согласуется — моменты начала откола, скорость распространения разрушений.

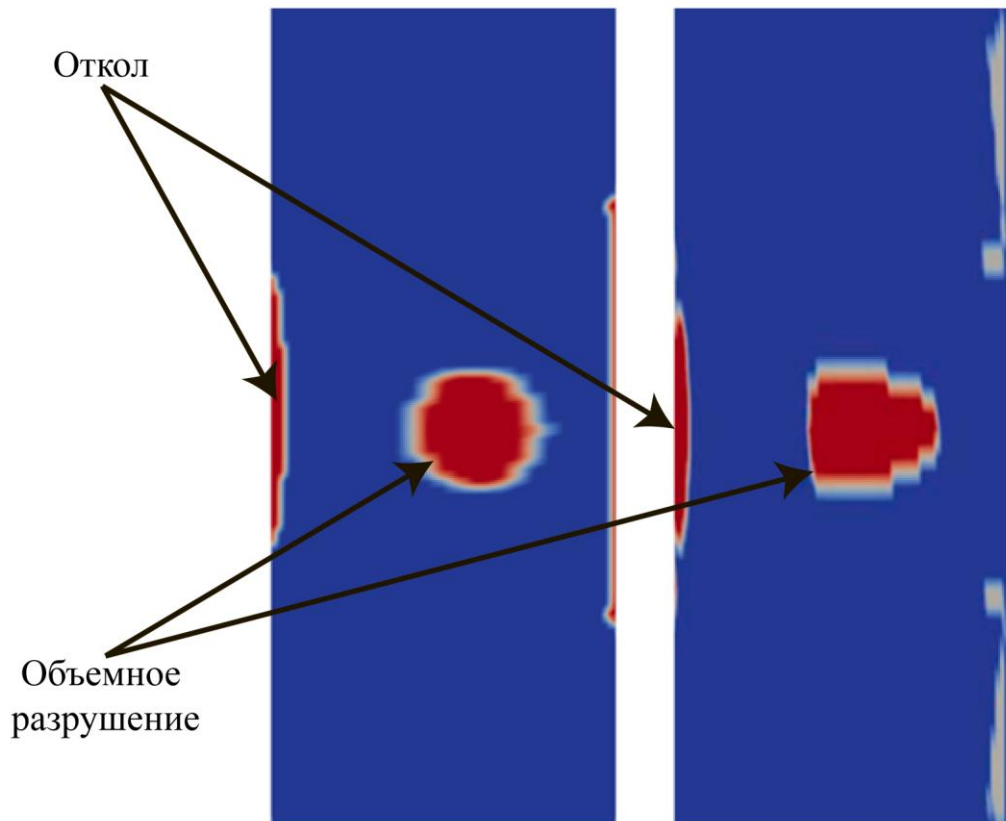


Рис 4.1 Области разрушения в расчетах, лагранжев (слева) и эйлеров (справа).

Такое высокое качественное и количественное соответствие результатов, полученных двумя независимыми методами, представляет собой важный аргумент в пользу корректности как самой математической модели, так и её численной реализации.

#### **4.2 Верификация численных моделей с использованием вспомогательных модулей**

Согласование результатов, полученных с помощью различных численных методов, является одним из наиболее надёжных способов верификации модели. В отличие от валидации, которая проверяет соответствие модели реальным

физическим экспериментам, верификация направлена на обеспечение того, что численное решение правильно аппроксимирует математическую модель — то есть что код решает ту задачу, которую мы хотели решить.

Поскольку эйлерова и лагранжева методики основаны на разных принципах дискретизации, имеют различные источники ошибок (например, численная диффузия в эйлеровых схемах против искажения сетки в лагранжевых), их согласование свидетельствует о том, что:

- Основные физические механизмы (перенос импульса, развитие волн напряжений, отражение волн, локализация разрушения) корректно воспроизводятся в обеих реализациях.
- Численные артефакты, связанные с конкретным методом, не доминируют в решении — это указывает на достаточную разрешающую способность сетки и корректность выбранных схем.
- Результаты не являются случайными или зависимыми от конкретной реализации — они отражают физическую суть процесса.

Таким образом, проведённое сравнение можно рассматривать как внутреннюю верификацию модели, основанную на принципе независимых реализаций. Такой подход широко применяется в вычислительной механике и гидродинамике, особенно при решении задач с нелинейными эффектами, где аналитическое решение недоступно.

Полученное согласование результатов имеет важное практическое значение:

- Подтверждает надёжность разработанных численных кодов для решения задач динамического разрушения и ударного взаимодействия.
- Создаёт основу для последующей валидации — теперь можно с уверенностью сравнивать результаты моделирования с

экспериментальными данными, зная, что численная ошибка не является доминирующим фактором.

Кроме того, данный результат подчеркивает важность методологического разнообразия в вычислительной механике. Использование нескольких подходов не только повышает доверие к результатам, но и позволяет глубже понять физику явления — каждая методика «видит» процесс под своим углом, и их совместный анализ даёт более полную картину.

### 4.3 Валидация лагранжевого модуля

#### 4.3.1 Постановка упругопластической задачи

Постановка данной задачи аналогична приведенной в работе [100].

В момент времени  $t = 0$  цилиндрический медный стержень длиной  $L$  и радиусом  $r$ , движущийся со скоростью  $250$  м/с, начинает взаимодействовать с жесткой поверхностью (рис. 4.2). Для описания поведения материала стержня, выбрана модель сжимаемой идеальной упругопластической среды механическое поведение которой характеризуется модулем сдвига  $G$  и некоторым эффективным пределом текучести  $\sigma_T$ .

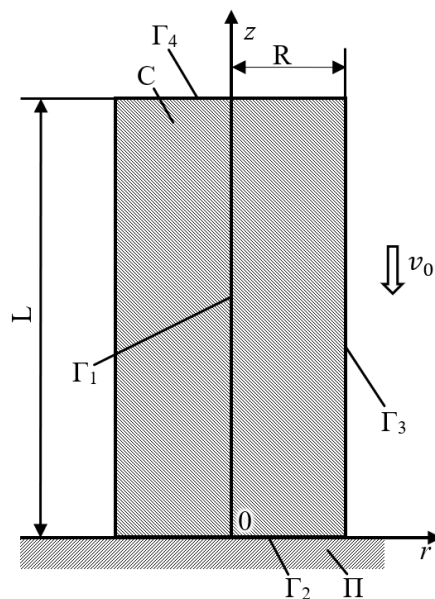


Рис. 4.2 Расчетная схема ударного взаимодействия: С – стержень;

П – преграда;  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$ ,  $\Gamma_3$ ,  $\Gamma_4$  – границы расчетной области.

### *Результаты*

Медь — поликристаллический материал с гранцентрированной кубической решёткой. Её зёрна имеют разную ориентацию, а в кристаллической структуре присутствуют точечные, линейные (дислокации) и поверхностные дефекты. На границах зёрен могут находиться включения примесей.

Под нагрузкой медь сначала деформируется упруго — за счёт обратимого изменения межатомных расстояний. При превышении предела упругости возникает пластическая деформация, обусловленная движением дислокаций и сдвигом атомных плоскостей по системам скольжения, характерным для ГЦК-решётки. Объём при этом практически не меняется, а деформация остаётся необратимой.

Хотя отдельные зёрна анизотропны, в целом медь ведёт себя как квазиизотропный материал: пластическая деформация сначала развивается в наиболее благоприятно ориентированных зёрнах, а затем распространяется на соседние. Это понимание важно для корректного моделирования поведения меди в инженерных расчётах.

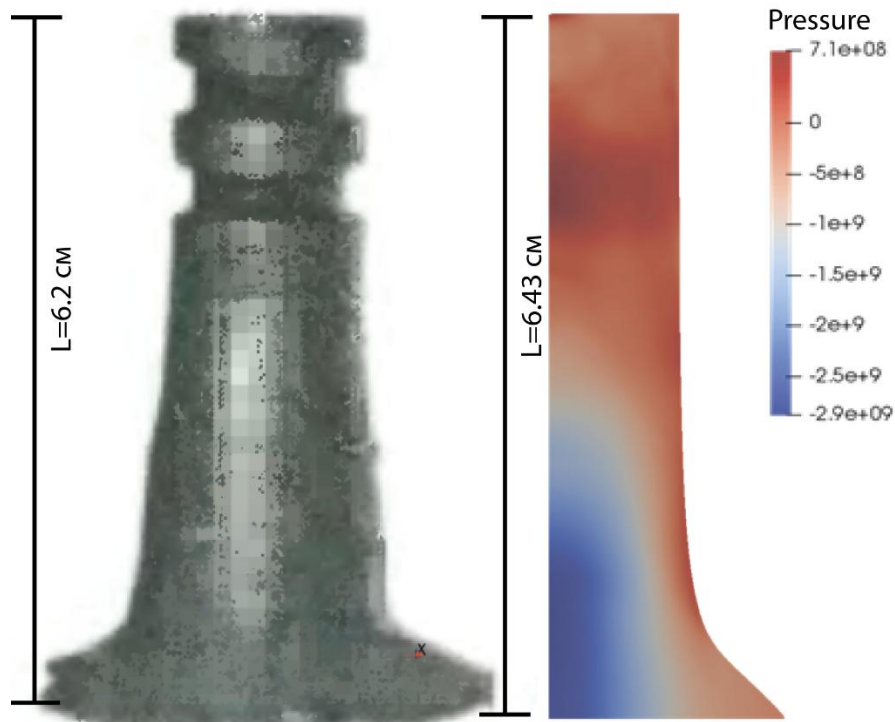


Рис. 4.3. Результаты расчёта и сравнение с экспериментом

#### 4.3.2 Задача о деформации контейнера

В данном разделе представлен пример сравнительного моделирования по эйлеровой и лагранжевой методикам деформации металлического контейнера. Целью расчетов являлось численное определение продольных и окружных деформаций, возникающих в оболочечной конструкции при ударном нагружении.

Цель расчета – определить изменение во времени деформаций в осевых (продольных) и кольцевых (окружных) направлениях, возникающих в конструкции при воздействии короткого импульса давления.

Нагружению подвергалась оболочечная конструкция, изображенная на рисунке 5.1 с геометрическими размерами: длина  $L = 3000$  мм, толщина оболочки  $h = 10$  мм, радиус оболочки  $R = 500$  мм.

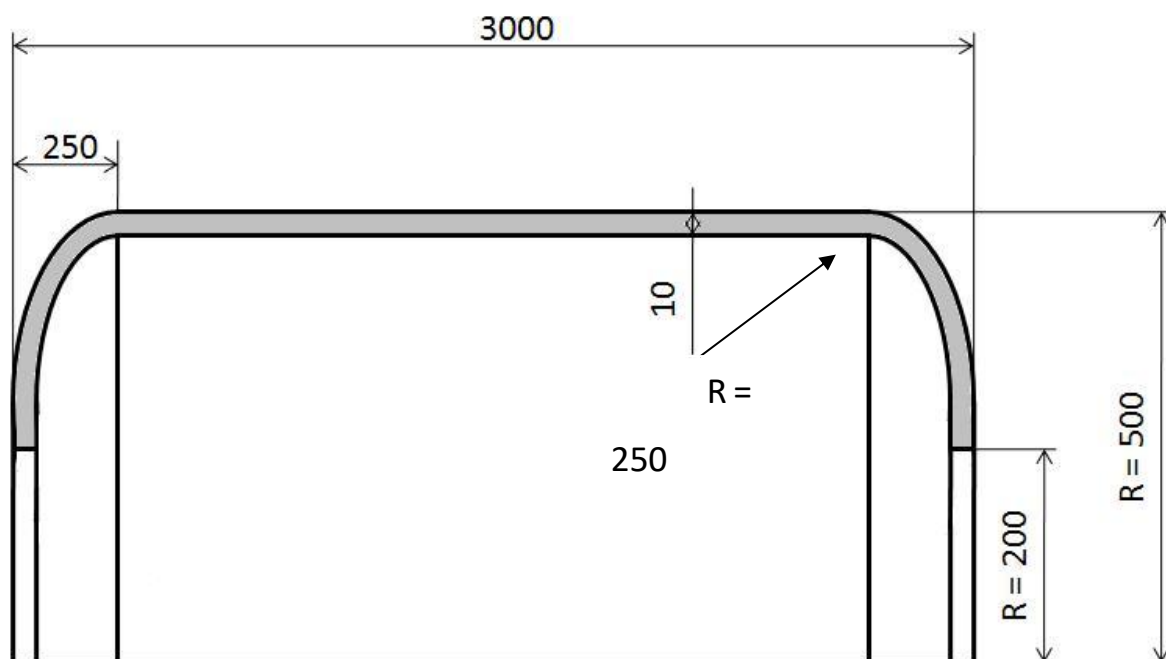


Рисунок 4.4 – Оболочечная конструкция с размерами, мм

Оболочечная конструкция изготовлена из полимерного материала, механические характеристики которого приведены в таблице 1.

Таблица 1.

1	Плотность материала, г/см <sup>3</sup>	1,4
2	Скорость звука, км/с	2,15
3	Откольная прочность, ГПа	0,22
4	Модуль упругости, ГПа	2,2
5	Предел прочности на растяжение, ГПа	1,85
6	Коэффициент Пуассона	0,37

### ***Параметры воздействующей нагрузки***

Характер распределения давления по поверхности конструкции: импульсная нагрузка  $P = 0,52 \text{ кПа} \cdot \text{с}$ , время действия импульса давления  $\tau = 100 \text{ мкс}$ .

Импульсная нагрузка действует на боковую поверхность оболочечной конструкции в пятне диаметром  $d = 0.65 \text{ м}$ .

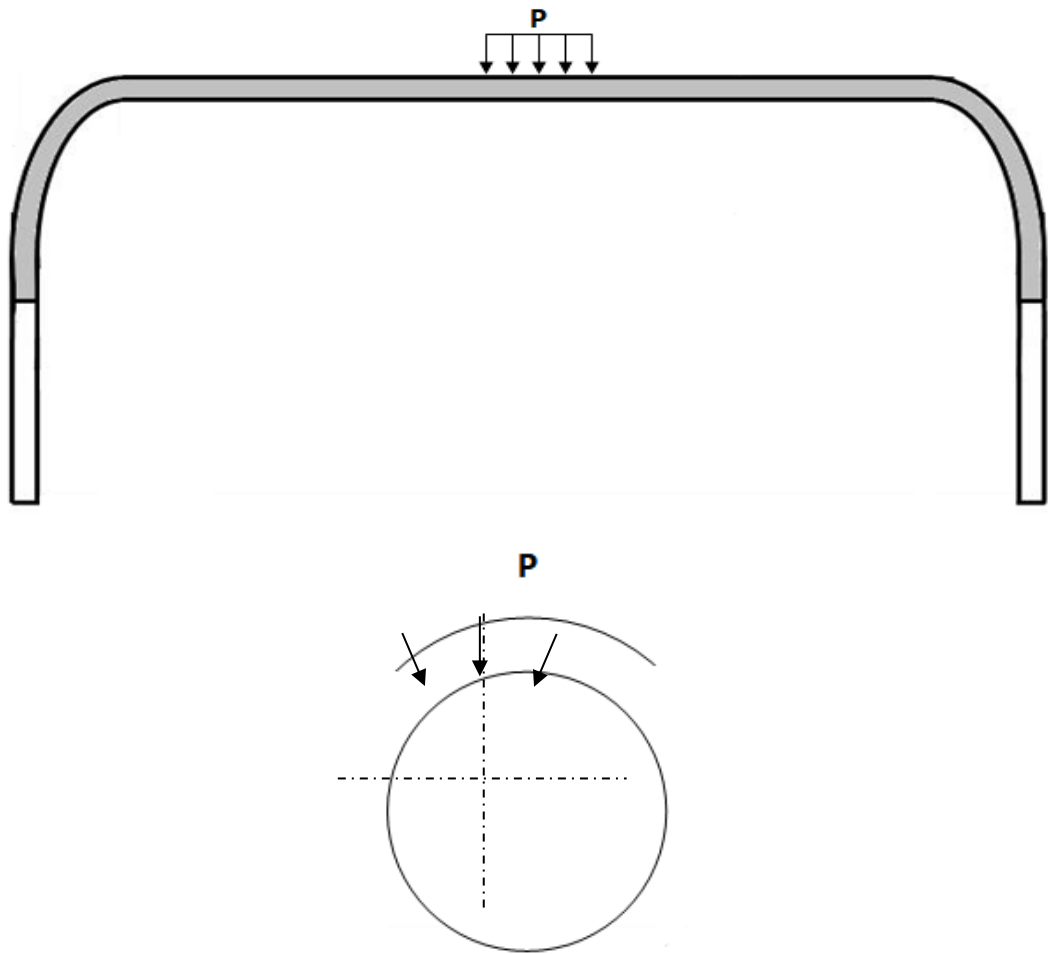


Рисунок 4.5 – Воздействие импульсной нагрузки и задание граничных условий

*Иллюстрации по результатам расчетов*

Результаты расчетов показаны на рис.4.6 – 4.9.

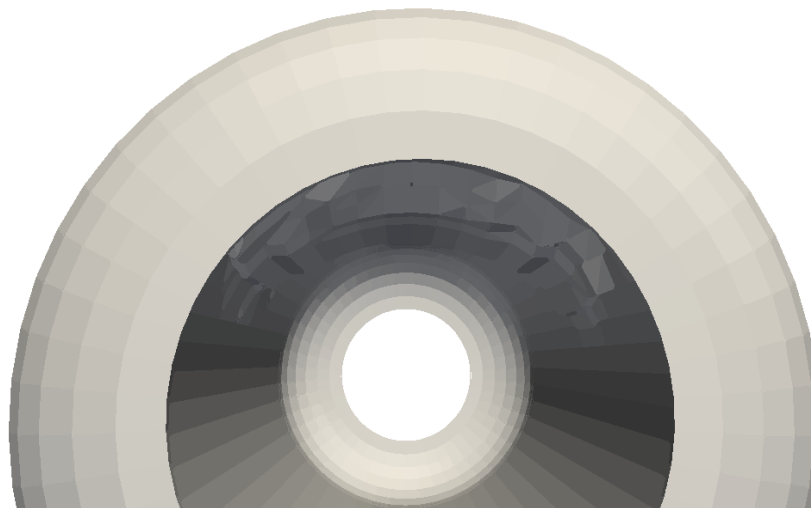


Рис. 4.6. – Деформация на момент времени  $t = 627$  мкс.

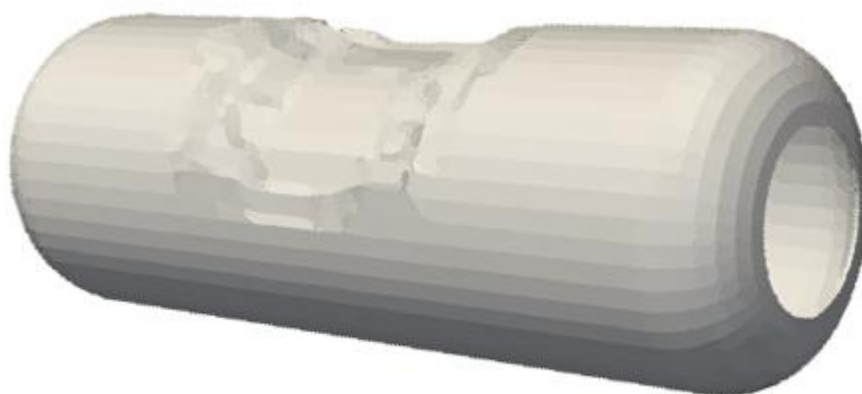


Рис. 4.7. Конечная деформация  $t = 627 \mu\text{s}$ ,  
максимальная деформация по оси Y:  $D_s = 11.7$  см.

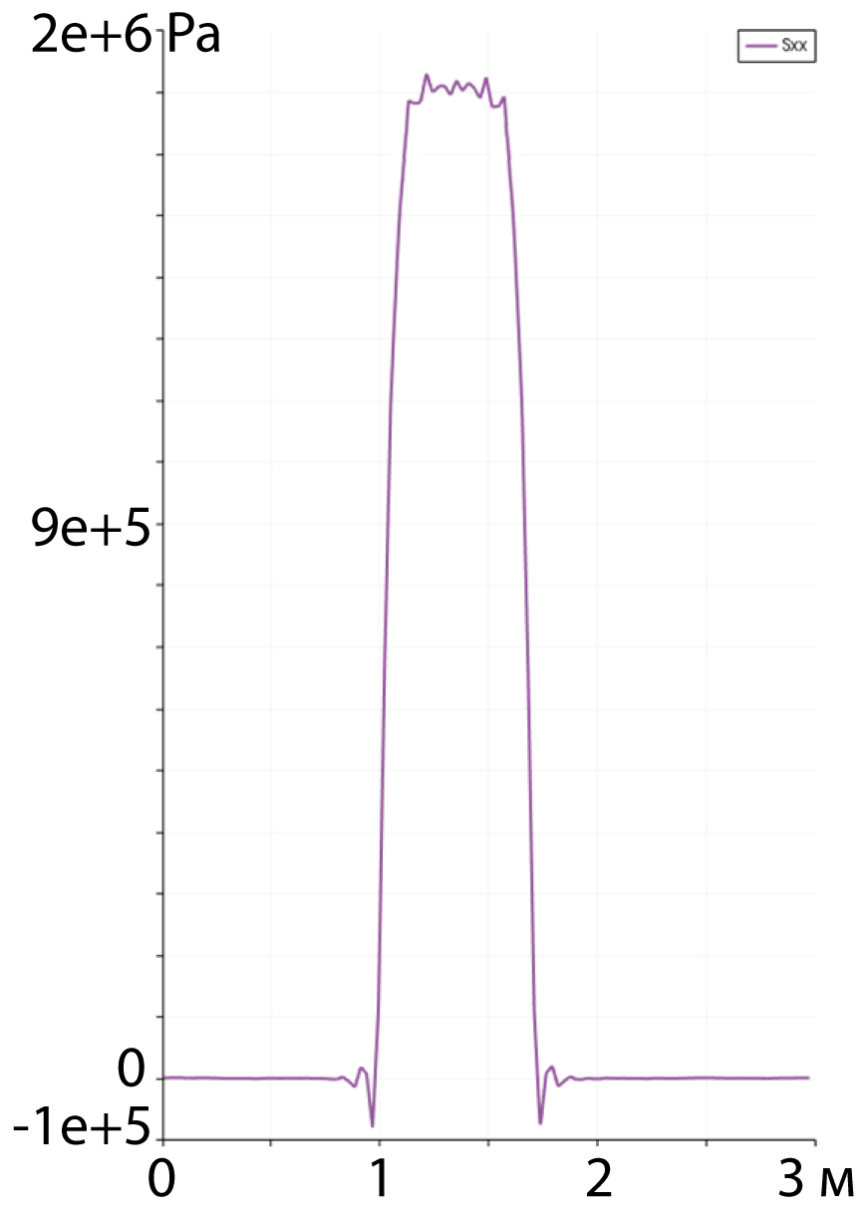


Рис. 4.8. - Продольное напряжение [Pa]  $S_{xx}$ ,  $t = 97 \mu s$

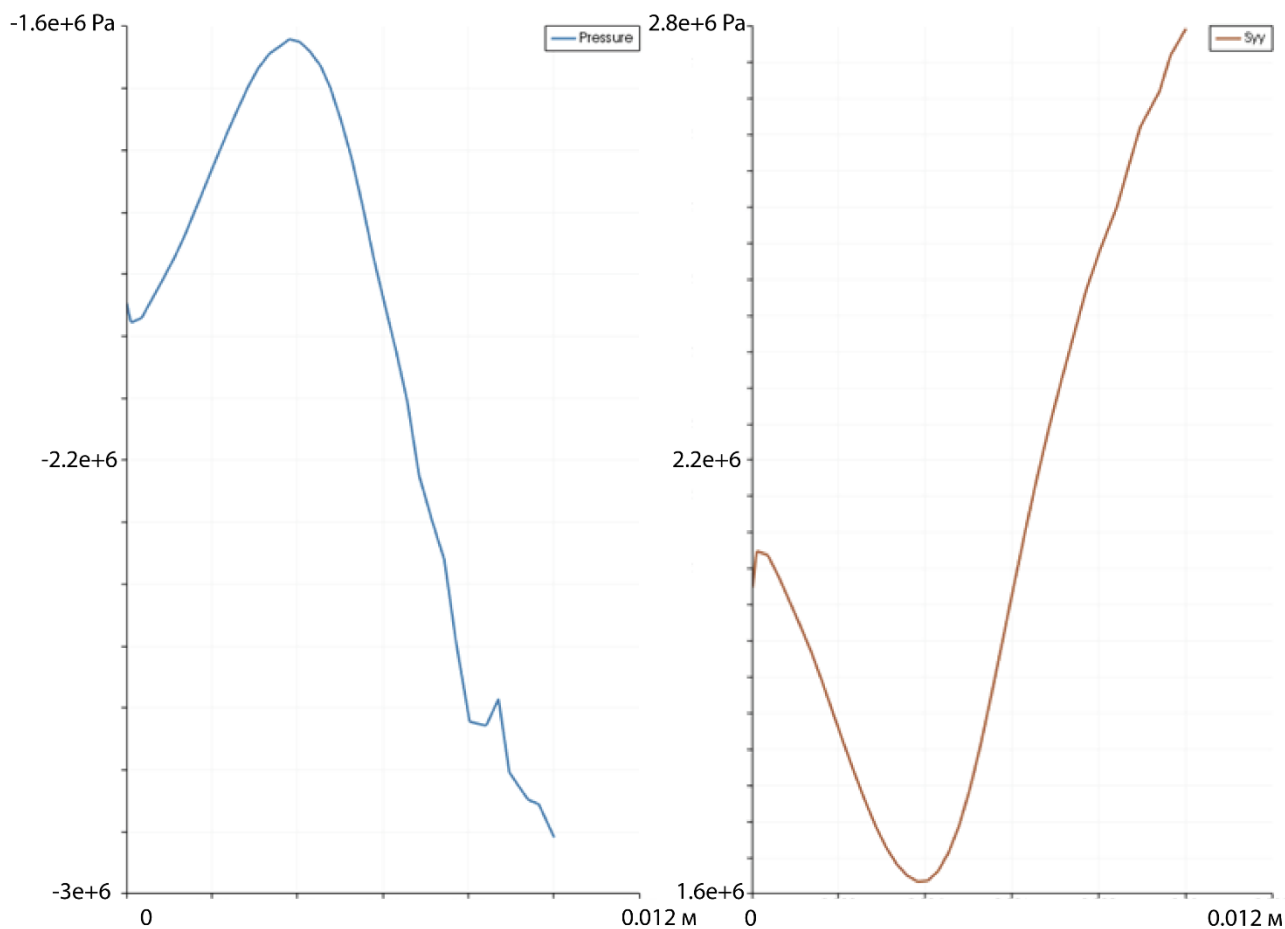


Рис. 4.9. – Давление [Па] и осевое напряжение [Па]  $S_{yy}$ ,  $t = 97 \mu s$

Расчет напряжений и деформаций в объекте выполнялся до момента времени  $t = 650$  мкс. Использовалась расчетная сетка  $5.7 \cdot 10^6$  элементов.

Результаты расчетов: с использованием аналитического УРС в форме Ми-Грюнайзена показали практически линейную зависимость деформации материала. При использовании уточненного УРС (QEOS) и модели упругопластической деформации материала, скорость деформации снизилась на 23%. Конечная деформация снизилась примерно на 5.2% в сравнении с упрощенной моделью. Результаты расчетов по лагранжевой и эйлеровой методикам отличаются незначительно, расхождение величины напряжений находится в пределах 10%. Величина прогиба корпуса различается в расчетах также примерно на 10%.

#### 4.4 Выводы по Главе 4

Реализован численный метод с использованием структурированных расчётных сеток для моделирования сложных волновых процессов, происходящих в многослойных конструкциях. Метод обладает возможностью определения области разрушения в результате воздействия различных динамических нагрузок, а также расчёта откликов разрушенных областей.

Выполнено моделирование упругопластических течений, возникающих под действием удара.

В результате проведённого сравнительного анализа было установлено, что численные решения, полученные с использованием эйлеровой и лагранжевой методик, демонстрируют высокую степень согласования как по форме, так и по интенсивности ключевых физических эффектов - откола и объёмного разрушения. Это согласование служит весомым доказательством корректности реализации численных алгоритмов, адекватности выбранных математических моделей и надёжности получаемых результатов.

Таким образом, проведённое исследование не только подтверждает работоспособность разработанных программных модулей, но и вносит вклад в общую методологию верификации численных моделей в области динамики деформируемых сред. Полученные результаты могут быть использованы в качестве эталонных при тестировании новых алгоритмов, а также при разработке гибридных схем, сочетающих преимущества обоих подходов.

Результаты данной главы опубликованы в работах:

1. Цыгвинцев И. П., Круковский А. Ю., Повещенко Ю. А., Гасилов В. А., **Бойков Д. С.**, Попов С. Б. Однородные разностные схемы для сопряженных задач гидродинамики и упругости // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2019. Т. 161. № 3. С. 377-392. (перечень ВАК, WoS, Scopus) DOI: [10.26907/2541-7746.2019.3.377-392](https://doi.org/10.26907/2541-7746.2019.3.377-392)
2. **Бойков Д. С.**, Болдарев А. С., Гасилов В. А. Численный анализ

магнитомеханического эффекта в нагревательных трубах. // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 4. С. 3-15. (перечень ВАК, Scopus)  
DOI: [10.20948/mm-2020-04-01](https://doi.org/10.20948/mm-2020-04-01)

3. Гасилов В. А., Круковский А. Ю., Повещенко Ю. А., Цыгвинцев И. П., **Бойков Д. С.** Неявная двухслойная лагранжево-эйлерова разностная схема газовой динамики на основе согласованных аппроксимаций уравнений балансов массы и импульса // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. № 38. С. 1-22. (перечень ВАК, РИНЦ)

## **ГЛАВА 5 МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ СИЛЬНОТОЧНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУЧКОВ НА КОНСТРУКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ.**

Глава 5 посвящена практическим задачам, решенным с помощью созданного программного обеспечения. Постановки задач соответствуют экспериментам по испытанию различных материалов, проводимым в НИЦ «Курчатовский Институт» на сильноточном электронном ускорителе «Кальмар» [6], генерирующем релятивистские электронные пучки (РЭП) с амплитудой тока до 45 кА при энергии электронов до 300 кэВ и полном флюенсе энергии на мишень до 1 кДж/см<sup>2</sup>. Длительность импульса составляет 100-200 нс. В результате поглощения электронов в конденсированном веществе происходит нагрев и испарение части материала, на неиспаренную часть образца действует импульс отдачи, инициирующий волновые процессы, которые могут привести к разрушению образца. Энерговклад электронного пучка учитывался в форме источника в уравнении баланса энергии. Импульс отдачи летящего испаренного материала непосредственно вычислялся в сквозном расчете напряженно-деформированного состояния в неиспарившемся остатке образца.

### **5.1 Моделирования воздействия РЭП на образец из эпоксидной смолы**

Исследование образцов из эпоксидной смолы представляет большой практический интерес, поскольку она является основой многих композиционных материалов, в частности углепластиков, которые широко применяются в различных отраслях промышленности. Эксперименты НИЦ КИ с прозрачными материалами [5,6,12,14 - 17] позволили получить большой объем данных как о волновых процессах и разрушениях в образцах, так и о динамике плазмы в диоде генератора РЭП. Эти данные были использованы для валидации созданных методик численного моделирования, калибровки широкодиапазонных УРС и критериев разрушения.

Рассматривался образец из эпоксидной смолы – цилиндр диаметром 35 мм и высотой 20 мм. Флюенс энергии 600 Дж/см<sup>2</sup>, поток электронов на мишень однородный по радиусу, имеет диаметр 1 см, время воздействия 0.1 мкс, время расчета 5 мкс.

Распределение энерговыделения по глубине образца перпендикулярно облучаемой поверхности моделировалось экспоненциальной зависимостью с эффективной глубиной поглощения  $L_{0,95}=0.6$  мм согласно экспериментальным данным, приведенным в статье [16].

Вычислительные эксперименты проводились в приближении однотемпературной гидродинамики с учетом теплопроводности и объемных потерь энергии на тормозное излучение. Энерговклад электронного пучка учитывался в форме источника в уравнении баланса энергии. Расчеты выполнены с использованием широкодиапазонных уравнений состояния на основе полуэмпирической модели QEOS для описания жидкой и твердой фазы вещества при низких температурах [65], подготовленных с помощью программы THERMOS [61].

Расчетная область включала исследуемый образец и фоновую разреженную среду (модельный лабораторный вакуум плотностью  $10^{-7}$  г/см<sup>3</sup>), в которой распространяется испаренный с облучаемой поверхности материал, см. рис. 5.1.

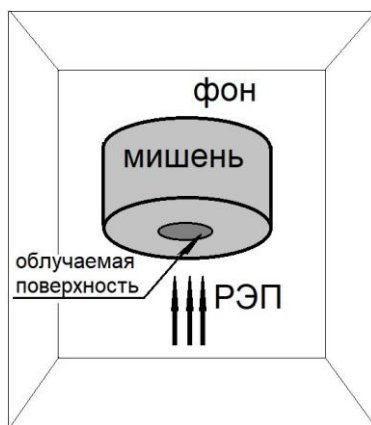


Рисунок 5.1. – Схема вычислительного эксперимента и расчетной области

Расчеты выполнялись в полной геометрической постановке в декартовой системе координат, в прямоугольном параллелепипеде  $-3.25 \leq x \leq 3.25$  см,  $-3.25 \leq y \leq 3.25$  см,  $-1.5 \leq z \leq 3$  см. На внешних границах заданы условия свободного выхода. Образец находится в области  $0 \leq z \leq 2$  см;  $z = 0$  – поверхность образца, на которую падает электронный пучок. Ось образца и направление пучка совпадает с осью Oz. Время расчета от 0.0 до 6.0 мкс от начала импульса тока.

В области была построена расчетная сетка, содержащая ~7 миллионов ячеек с шагами по координатам  $h_x = h_y = 0.05$  см,  $h_z = 0.01$  см. Расчет выполнялся на суперкомпьютере К-60 в ИПМ РАН, типовой расчет на 512 вычислительных ядрах занимает около 10 часов астрономического времени.

Были выполнены расчеты для ряда значений флюенсов энергии от  $150 \text{ Дж/см}^2$  до  $650 \text{ Дж/см}^2$  с целью определения скорости разлета испаренного вещества, испаренной массы, механического импульса отдачи и скорости ударной волны в образце. Эти параметры сравнивались с экспериментальными данными для калибровки широкодиапазонных УРС.

На рис. 5.2 представлены характерные распределения плотности и давления при флюэнсе энергии  $600 \text{ Дж/см}^2$  на момент времени  $t = 2$  мкс (начало формирования упругой волны в материале). Изображены изолинии в сечении расчетной области плоскостью симметрии. Облучаемой поверхности соответствует  $Z=0$  (нижняя поверхность образца). На рисунке 5.2 а) видно наблюдаемое в эксперименте образование плазменного факела из вещества, испаренного с передней поверхности мишени. Температура в факеле достигает нескольких эВ. На облучаемой поверхности в результате испарения материала мишени образуется каверна, вблизи оси она имеет максимальную глубину порядка 1 мм, что совпадает с характером разрушений на поверхности экспериментальных образцов. Внутри образца формируется волна сжатия (см. рис. 5.2 б).

а)	б)
----	----

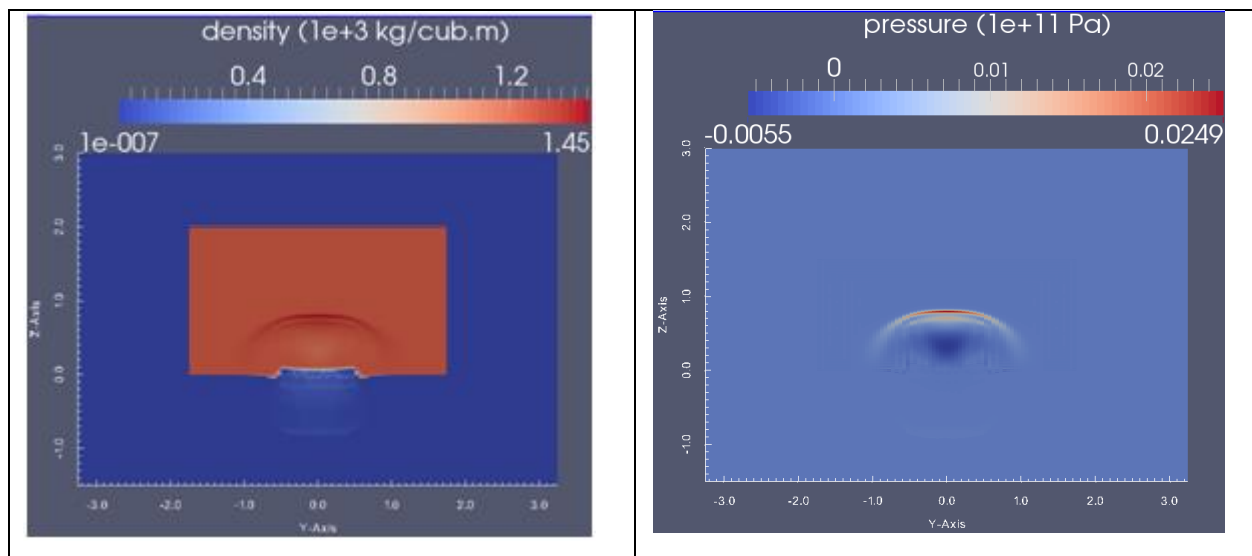


Рис. 5.2 – Взаимодействие РЭП с образцом из эпоксидной смолы:  
а) плотность, б) давление,

На рис. 5.3 приведены экспериментальные и расчетные оценки скорости разлета испаренной плазмы, массы испаренного материала и импульса давления для различных значений энерговклада. Черными квадратами обозначены экспериментальные точки, приведенные в работе [5]. Черные кружки – расчетные значения, полученные в результате моделирования.

Рис. 5.4 иллюстрирует расчет напряженно-деформированного состояния. Показаны напряжения в образце на момент времени  $t = 5.2$  мкс (формирование тыльного откола).

В результате расчета с использованием критериев разрушения по главному напряжению были выявлены наблюдаемые в эксперименте характерные области разрушения материала: испаренная каверна на облучаемой поверхности, внутреннее объемное разрушение и тыльный откол, На рис. 5.5 цветом показаны значения переменной  $\Psi$  агрегатного состояния на момент окончания расчета  $t = 6$  мкс.

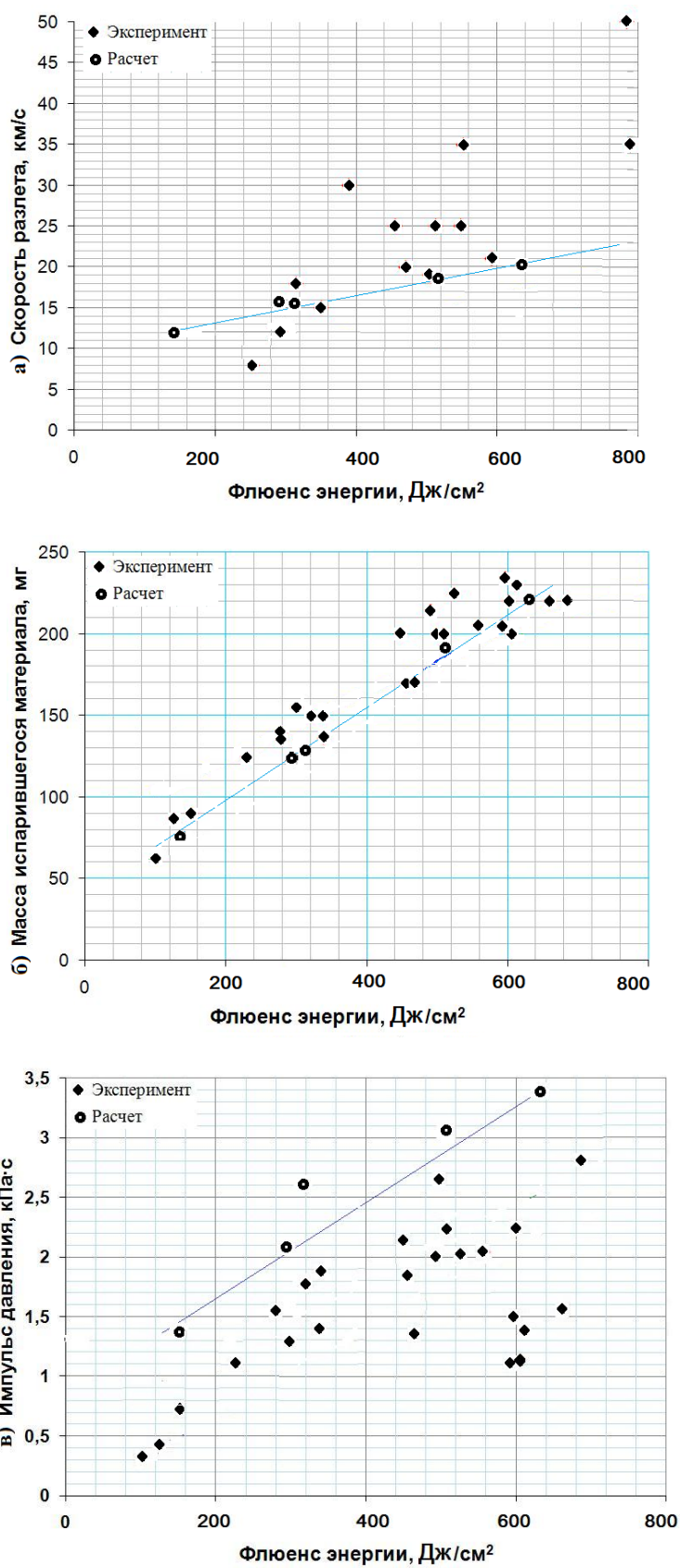


Рис. 5.3 – а) скорость разлёта плазмы с поверхности мишени, б) масса испаренного материала, в) импульс давления.

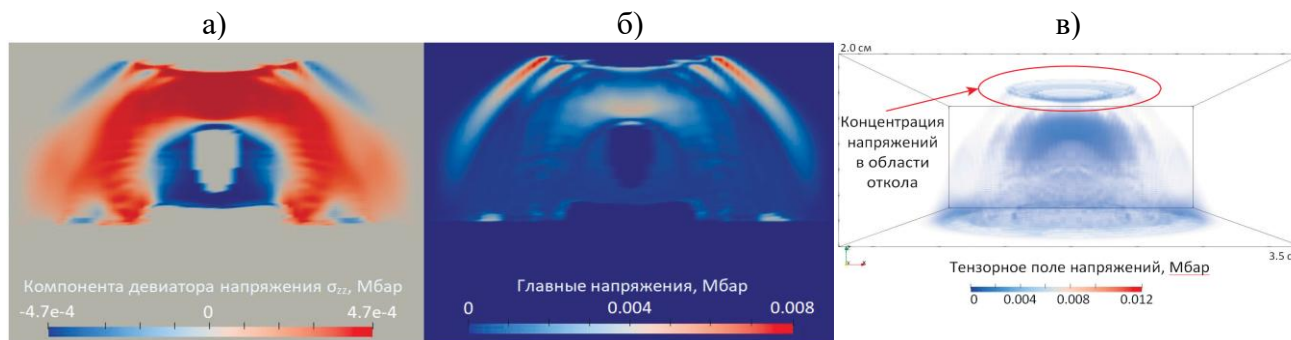


Рисунок 5.4. а) – распределение компоненты  $\sigma_{zz}$  дивергента напряжений (Мбар),  
 б) – векторное поле главных напряжений (Мбар),  
 в) – тензорное поле напряжений (Мбар).

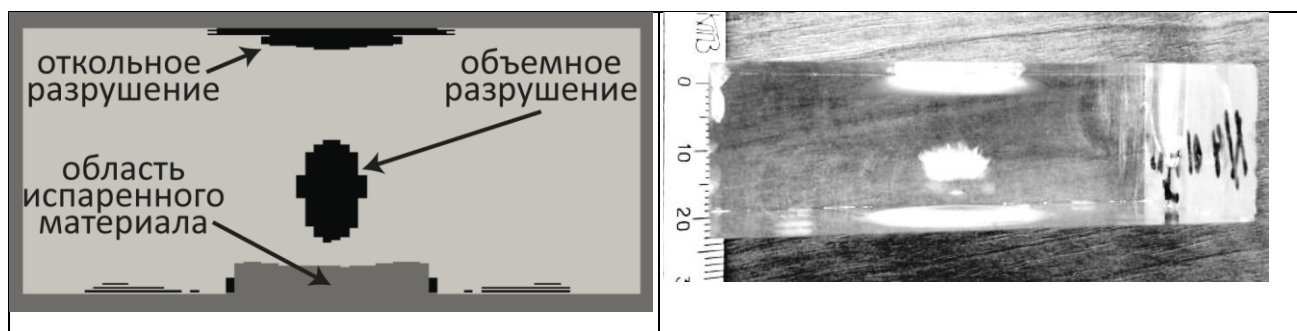


Рисунок 5.5. Слева – переменная агрегатного состояния:  
 светло серый –  $\Psi=1$  упругопластическая область неразрушенного материала,  
 черный –  $\Psi=3$  упругопластическая область разрушенного материала,  
 темно серый –  $\Psi=0$  газодинамическая область (испаренный материал и фон).  
 Справа – фотография экспериментального образца после воздействия РЭП.

Необходимо отметить, что продемонстрированный в ходе численного решения задачи механизм возникновения разрушения в объёме, вызванного растягивающими напряжениями под действием квазисферических волн, является принципиально трёхмерным. Явление тыльного откола возможно смоделировать даже в одномерной постановке, но получить разрушение в объёме, вызванное взаимодействием сходящихся сферических волн, в одномерной постановке невозможно.

Сравнение результатов проведенных расчетов с экспериментальными данными о разлете анодной плазмы в диодном промежутке [98] и скорости

распространения упругих волн в материале [14] позволяет сделать вывод об эффективности созданной методики сквозного моделирования действия РЭП на полимерные мишени.

На основании расчетов была оценена скорость разлета плазмы с облучаемой поверхности, масса испаренного вещества и импульс механического давления в образце. Сопоставление этих параметров с экспериментальными данными использовалось для калибровки широкодиапазонных УРС.

Варьирование в расчете прочностных характеристик материала ведёт к заметному изменению размеров разрушенной области внутри образца. Таким образом, после верификации модели на экспериментальных данных ее можно использовать для анализа прочности конструкций.

## **5.2 Моделирования воздействия РЭП на многослойную конструкцию**

Прочностные исследования многослойных материалов представляют большой интерес, поскольку они могут служить как элементами конструкций (балки, пластины, оболочки) и преградами для защиты от различных воздействий, так и прототипами слоистых композитов. Напряжённо-деформированное состояние таких конструкций существенно зависит от физико-механических и геометрических характеристик слоёв.

В НИЦ КИ были проведены эксперименты по формированию ударных волн в многослойных диэлектрических мишенях под действием релятивистского электронного пучка [18]. Исследовались вопросы прохождения ударной волны через границу раздела сред и затухания волны в пористых и упругих материалах. Получены экспериментальные данные для нескольких пар распространенных конструкционных материалов.

Методом математического моделирования изучалось воздействие РЭП на многослойную конструкцию, изображенную на рис. 5.6. Мишень состоит из трех слоев: свинец – толщина 0,03 см, углепластик – 0,07 см, эпоксидная смола – 0,4

см. Объект находится в лабораторном вакууме. Параметры воздействующей нагрузки: флюенс энергии  $750 \text{ Дж/см}^2$ , время воздействия  $100 \text{ нс}$ , время расчета  $3 \text{ мкс}$ . Энерговклад РЭП был рассчитан с помощью программы математического моделирования каскадных процессов переноса излучения в гетерогенных материалах (разработка ИПМ им. М. В. Келдыша РАН) [99] и использовался в расчете в виде источника в уравнении энергобаланса. Расчет выполнялся в полной трехмерной постановке, расчетная сетка состояла из  $\sim 4$  миллионов ячеек. РЭП направлен вдоль оси Oz расчетной области, фронтальная сторона мишени, на которую падает РЭП имеет координату  $z=0.1 \text{ см}$ .

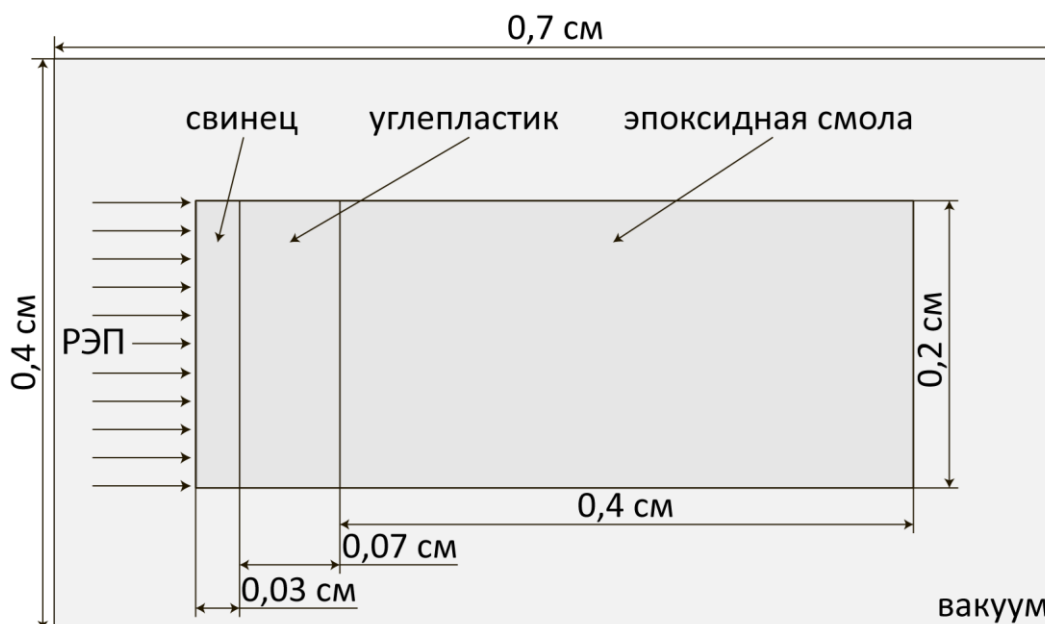


Рисунок 5.6. Схема вычислительного эксперимента и расчетной области.

Энерговклад РЭП приводит к испарению части материала и возникновению в мишени импульса давления. На рис. 5.7 показано распределение плотности и давления в мишени на момент времени  $t = 0.3 \text{ мкс}$ . Представлено сечение плоскостью симметрии  $x=0.2 \text{ см}$ . В нижней части рисунка перед мишенью видна область испаренной плазмы свинца, температура в факеле достигает  $6 \text{ эВ}$ . В свинце возникает волна сжатия, которая частично отражается от границы

материалов, а частично проникает в область углепластика.

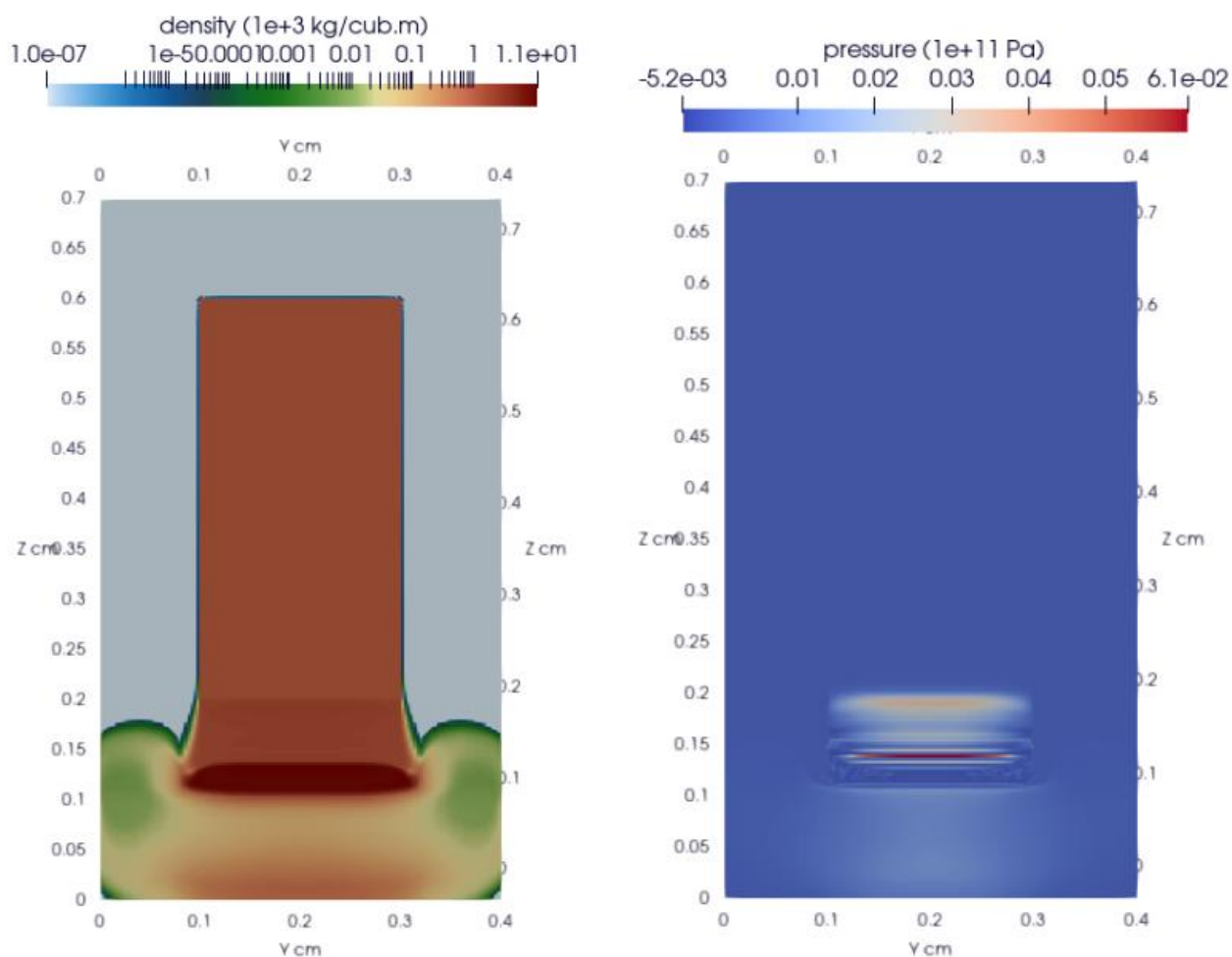


Рисунок 5.7.  $t = 0.3$  мкс.

Слева – плотность ( $\text{кг/м}^3$ ), справа – давление ( $10^{11}\text{Па}$ ).

В мишени распространяется ударная волна, после ее взаимодействия с границей раздела углепластика и эпоксидной смолы формируется волна разрежения. Частично волна сжатия распространяется в слой эпоксидной смолы. Там, где давление растяжения достигает значения, превышающего предел прочности на разрыв, начинается формирование откола. На рис. На рис. 5.8 показано распределение плотности и давления в мишени на момент времени  $t = 0.5$  мкс, а также значения переменной агрегатного состояния, иллюстрирующие начало разрушения мишени.

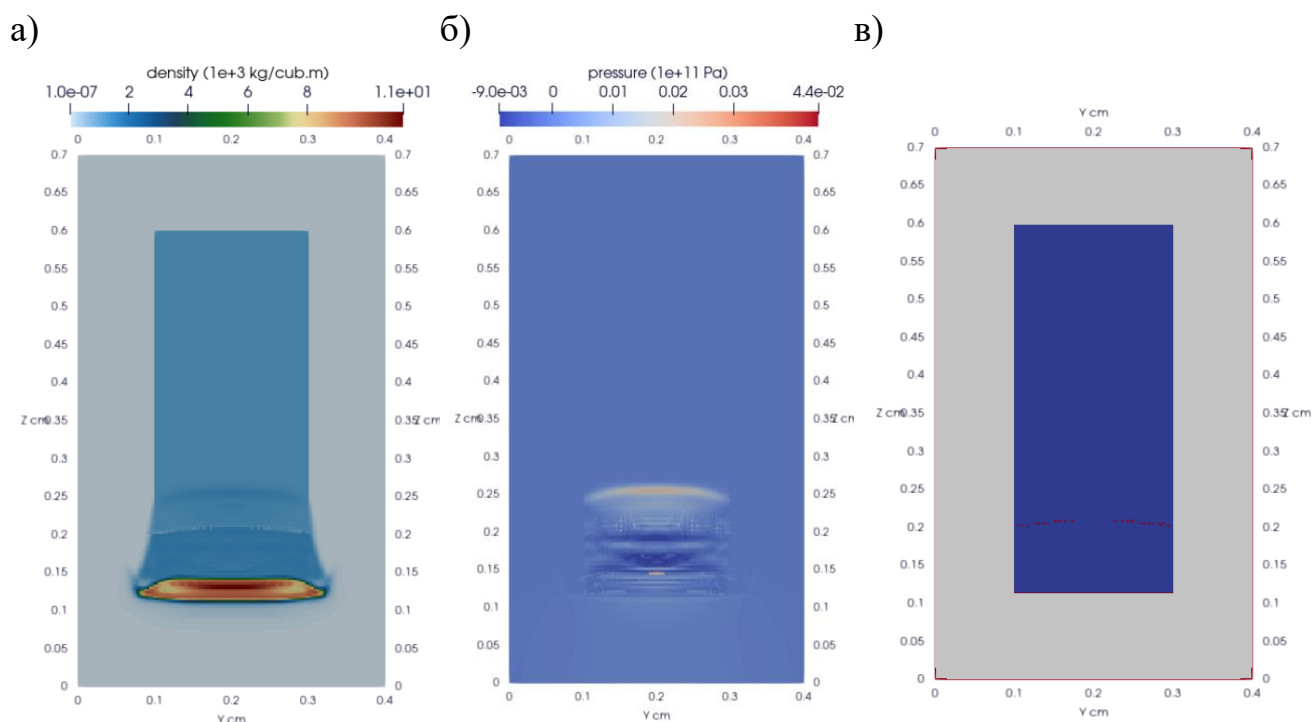


Рисунок 5.8.  $t = 0.5$  мкс.

а) – плотность ( $\text{кг}/\text{м}^3$ ), б) – давление ( $10^{11}$  Па),  
 в) – переменная агрегатного состояния:  
 синий –  $\Psi=1$  упругопластическая область неразрушенного материала,  
 красный –  $\Psi=3$  разрушенный материал,  
 серый –  $\Psi=0$  газодинамическая область (испаренный материал и фон).

В дальнейшем взаимодействие отраженных волн в объеме эпоксидной смолы приводит к появлению объемных разрушений. К моменту  $t = 1.45$  мкс, показанному на рис. 5.9 мишень полностью разрушена: между слоями углепластика и эпоксидной смолы образовалась трещина.

Таким образом, моделирование позволяет изучать поведение многослойных конструкций различных конфигураций при динамических нагрузках. Разработанный подход может применяться для микромеханического анализа слоистых композитов на основе углепластиков.

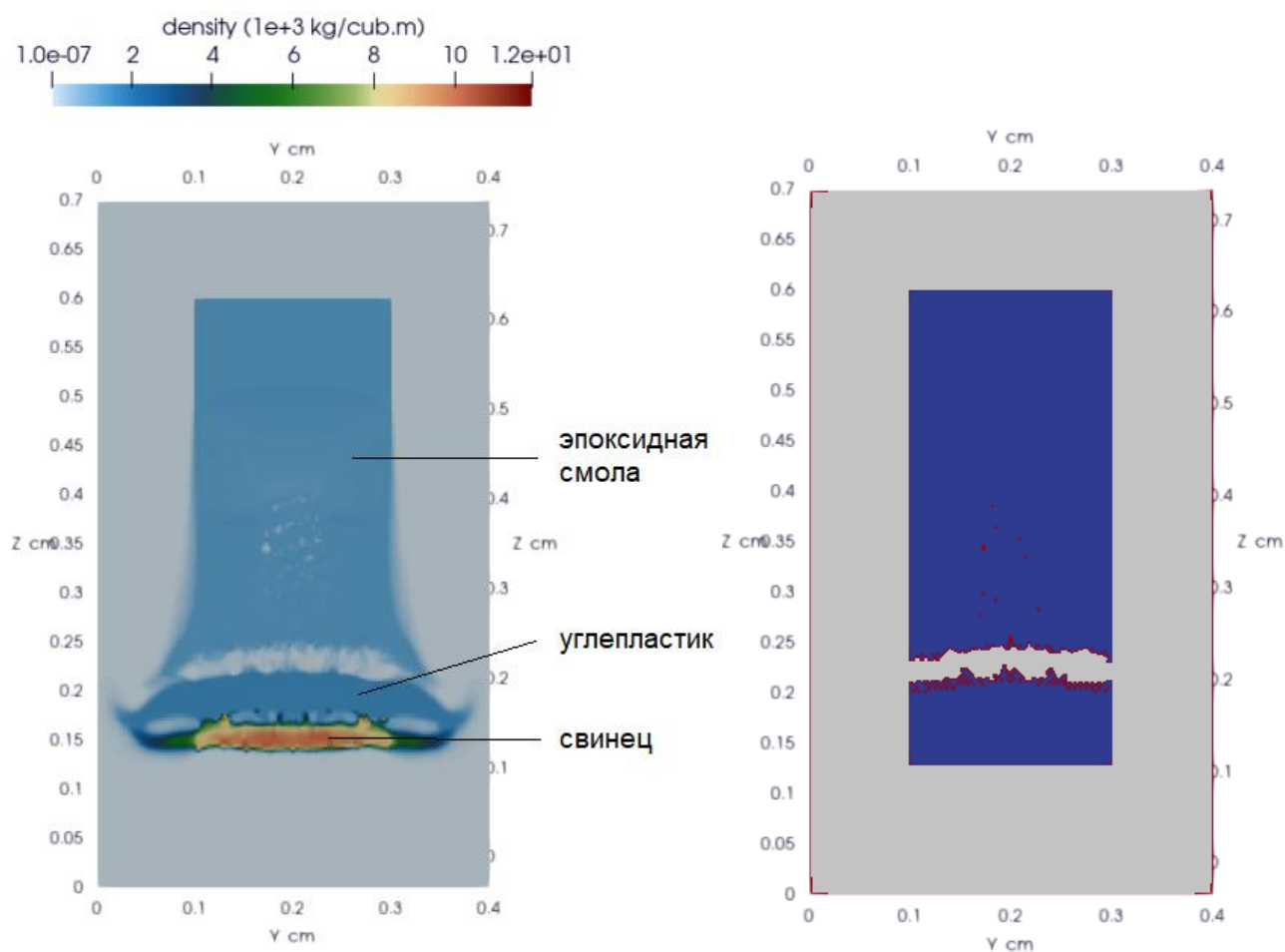


Рисунок 5.9. Разрушение слоистой конструкции. Слева – распределение плотности, справа – переменная агрегатного состояния: синий –  $\Psi=1$  упругопластическая область неразрушенного материала, красный –  $\Psi=3$  разрушенный материал, серый –  $\Psi=0$  газодинамическая область (испаренный материал и фон).

### 5.3 Моделирование воздействия РЭП на композиционный материал с дисперсным наполнителем

Непосредственное моделирование напряженно-деформированного состояния (НДС) сферопластика (синтактной пены) – достаточно трудоемкая вычислительная задача. Плотность расположения сферических включений в связующем весьма высокая, в  $1 \text{ мм}^3$  композиционного материала содержится  $\sim 10^3$  сферических включений. На рис. 5.9 приведена типовая микрофотография объёма сферопластика после воздействия РЭП, полученная в НИЦ КИ [30].

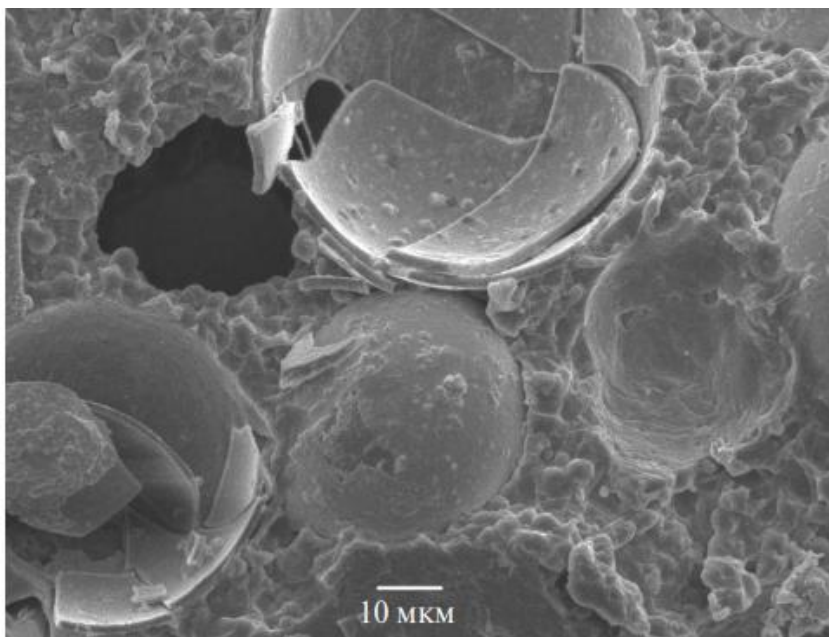


Рис. 5.10 Разрушенные микросферы в объёме сферопластика.

Реалистичным выглядит подход, в котором на первом этапе необходимо провести расчет НДС для отдельного сферического элемента, нагруженного волной давления. Такой расчет позволяет определить условия разрушения микросферы. Следующий этап заключается в моделировании образца гетерогенного материала, в котором свойства наполнителя получены из предыдущего расчета. После этого возможно проделать процедуру осреднения свойств гетерогенного материала [101].

### 5.3.1 Моделирование воздействия ударной волны на микросферу

Было проведено моделирование элементарной ячейки композита, учитывающее упругие свойства и объемные содержания компонентов. Объектом исследования является многослойная сферическая структура, геометрическая модель которой представлена на рисунке 5.11. Конструкция состоит из трёх последовательных слоёв: внешнего — из эпоксидной смолы толщиной 7,35 мкм, промежуточного — из вольфрама толщиной 0,15 мкм и

внутреннего — из стекла толщиной 2,50 мкм. Центральная область сферы представляет собой вакуумную полость радиусом 10,00 мкм.

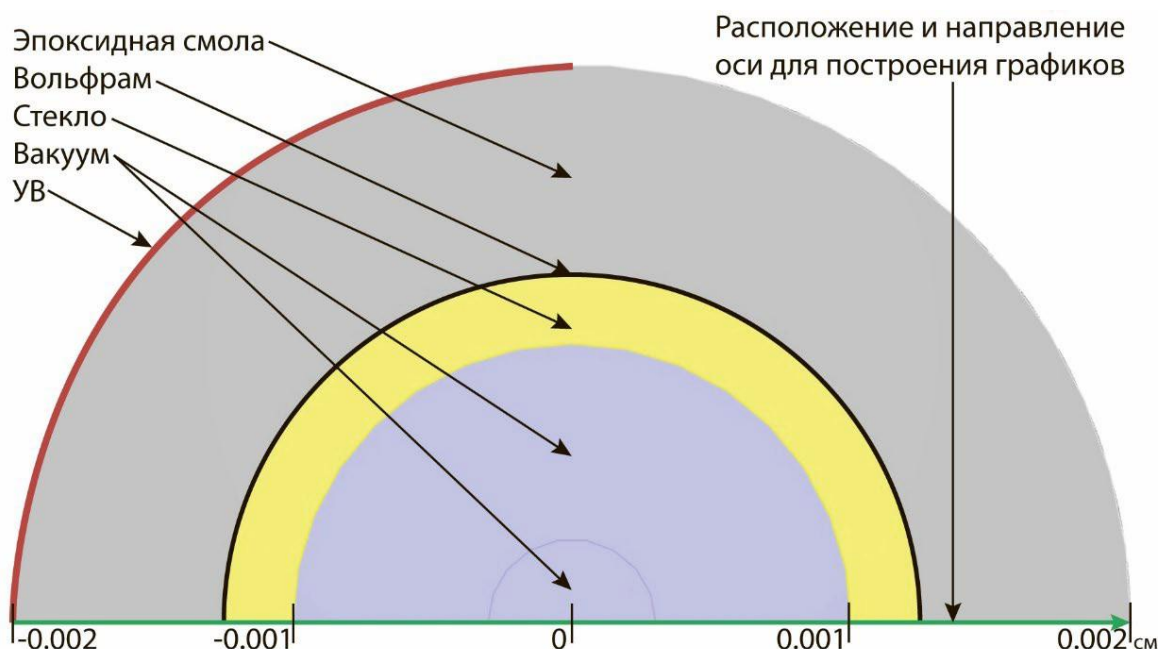


Рис. 5.11 Геометрическая модель.

В качестве внешнего воздействия задавалось объёмное распределение энерговклада  $Q_s(x,y,z,t)$ , моделирующее термодинамические параметры, возникающие при взаимодействии плоской ударной волны с криволинейной поверхностью. Нагрузка носит трёхмерный характер, однако обладает осевой симметрией относительно направления распространения ударной волны. Это позволило ограничить вычисления одной четвертью полной расчётной области с наложением соответствующих граничных условий симметрии на координатные плоскости, что значительно сократило вычислительные затраты без потери физической достоверности решения. Такой подход согласуется с общепринятой практикой моделирования симметричных динамических задач в механике сплошных сред [102, 103].

В результате воздействия в структуре формируется квазисферическая

ударная волна с максимальной амплитудой давления 21 ГПа в точке торможения. Численное моделирование проводилось на гибридной сетке, сочетающей тетраэдрические и призматические элементы, общее количество которых составило  $7,4 \cdot 10^6$ . Расчет проведен на суперкомпьютере К60 (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).

### *Результаты и обсуждение*

Анализ эволюции структуры под действием ударной нагрузки показал, что в промежуточном вольфрамовом слое формируются неоднородные микроструктуры, приобретающие на указанном временном срезе продолговатую форму. Внутренние оболочки — как вольфрамовая, так и стеклянная — претерпевают разрушение. Часть материалов (стекло, вольфрам и эпоксидная смола) переходит в пластичное состояние и интенсивно сжимается в направлении центра вакуумной полости. К моменту  $t = 0,003$  мкс (см. рис. 5.12 – 5.15). Образовавшаяся смесь заполняет около 70 % первоначального объёма полости. Дальнейшее охлаждение смеси до твёрдотельной температуры ( $\sim 900$  °С) происходит в течение  $\sim 82$  мкс.

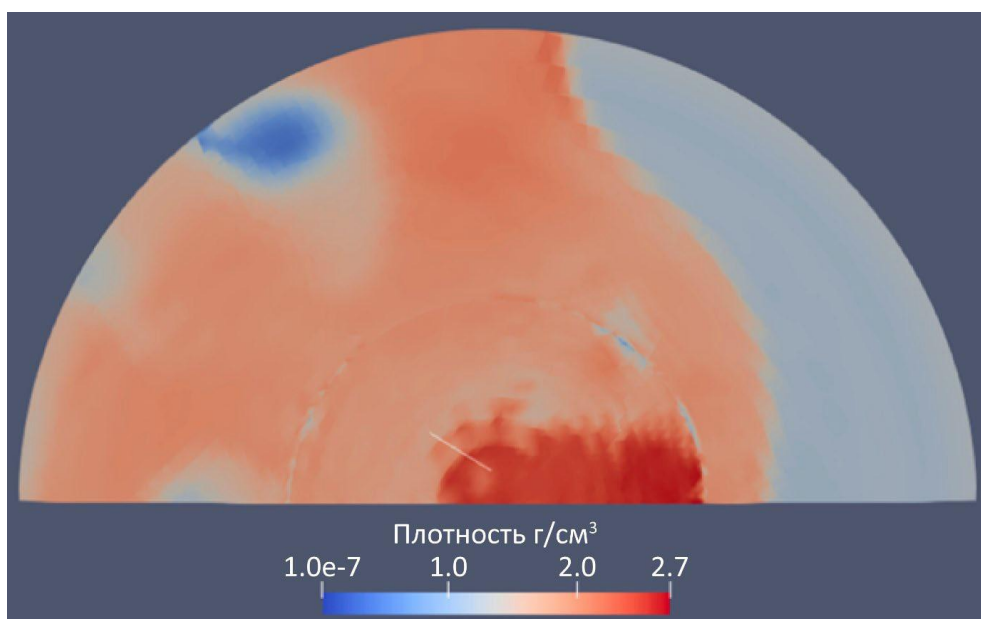


Рис. 5.12. Распределение плотности на момент времени  $t = 0.003$  мкс.

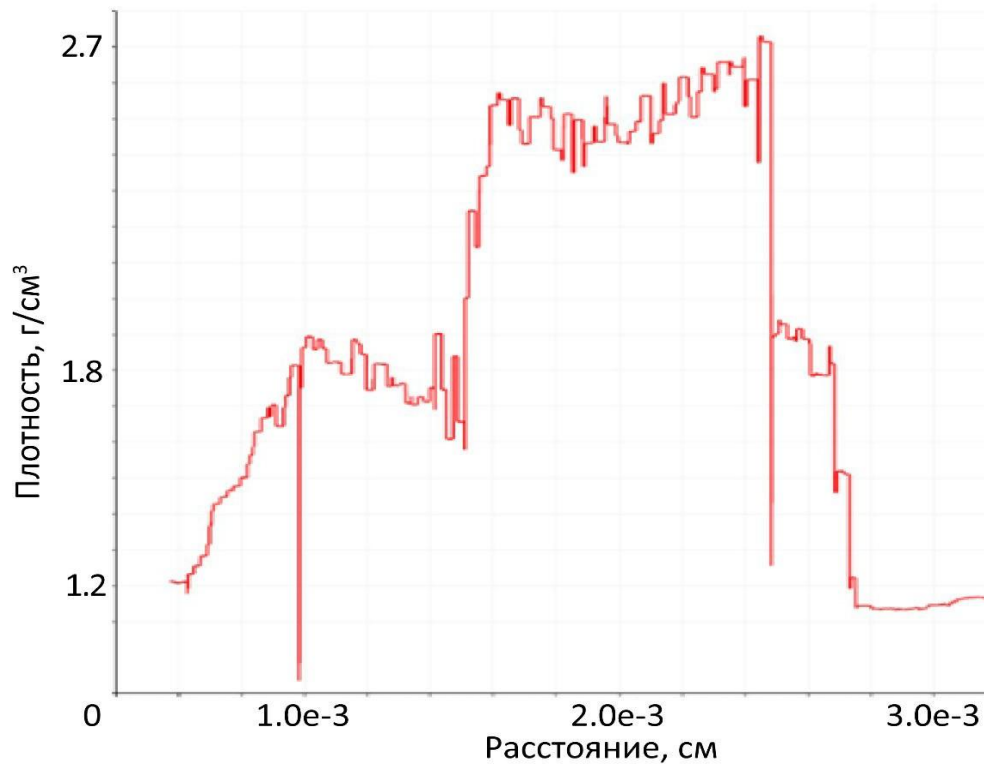


Рис. 5.13. Распределение плотности по оси симметрии на момент времени  $t = 0.003$  мкс.

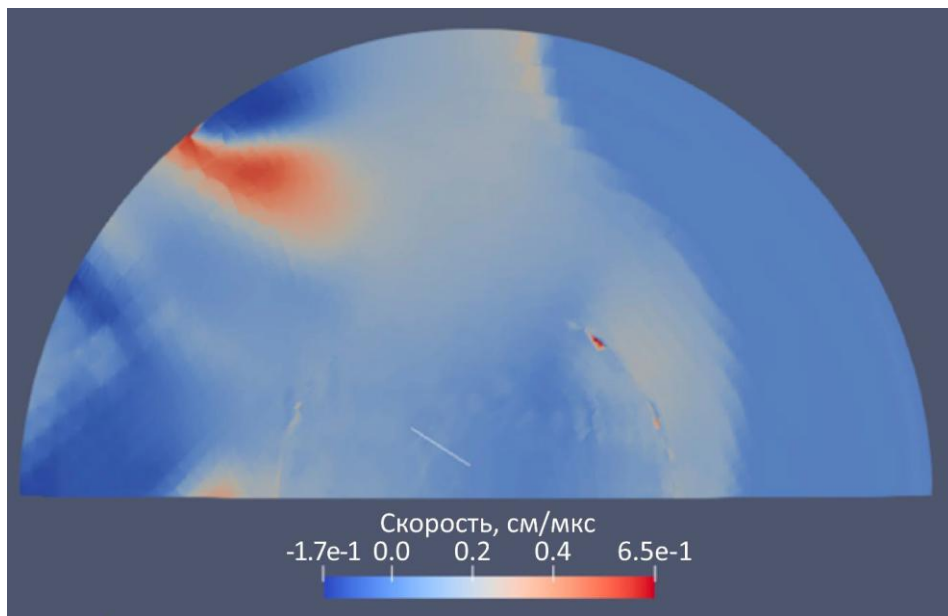


Рис. 5.14. Распределение скорости на момент времени  $t = 0.003$  мкс.

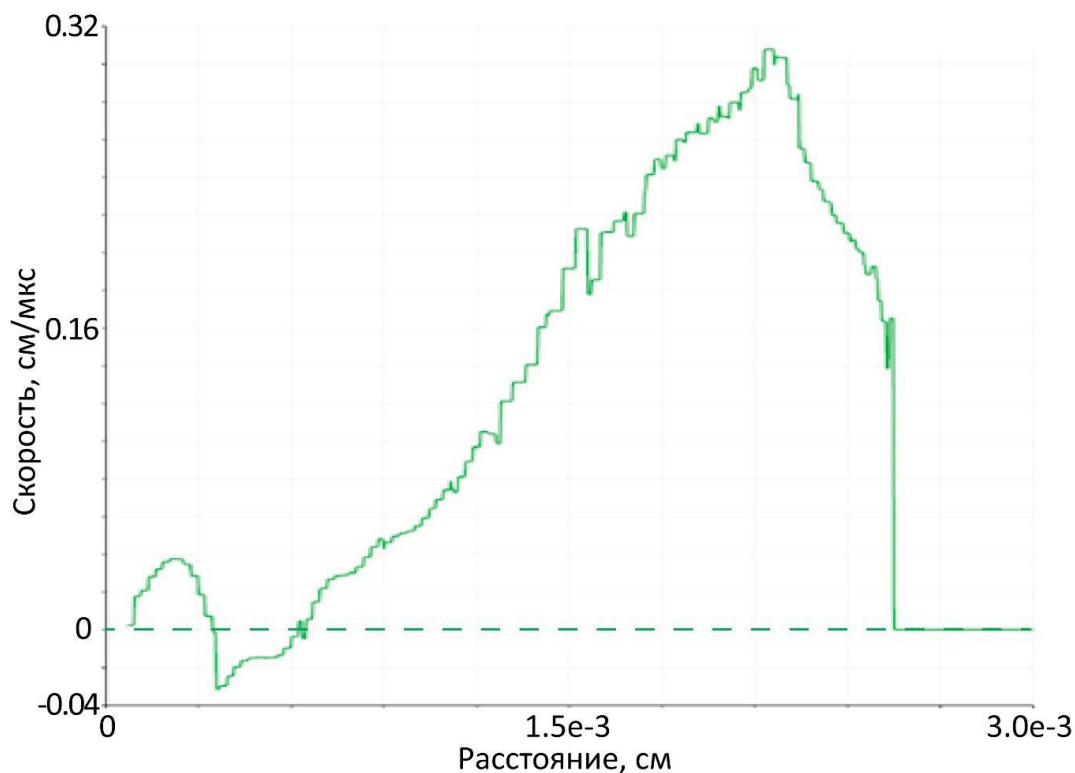


Рис. 5.15. Распределение скорости по оси  $OZ$  на момент времени  $t = 0.003$  мкс.

Установлено, что вольфрам, благодаря высокой плотности, температуре плавления и прочностным характеристикам, оказывает существенное влияние на устойчивость композитной структуры к ударным воздействиям [104]. При давлении во фронте ударной волны  $P_{\max} = 21$  ГПа достигаются экстремальные термодинамические условия: максимальная температура  $T_{\max} \approx 7000$  К, плотность коллапсирующего вещества до  $26$  г/см<sup>3</sup>, а скорость деформации  $\sim 1,54 \cdot 10^6$  с<sup>-1</sup>.

Выявленные механизмы разрушения — неоднородность распределения давления по поверхности микросферы, локализованное пластическое течение и фрагментация оболочек — согласуются с известными представлениями о динамическом поведении синтактических пен под высокоскоростной нагрузкой [105]. Наблюдаемое формирование продолговатых структур в вольфрамовом слое может быть связано с зарождением нановискеров или других неоднородностей, типичных для тугоплавких металлов при экстремальных

условиях деформирования [106].

### **Выводы**

Полученные результаты расширяют понимание механизмов взаимодействия ударных волн с многослойными микросферическими включениями, содержащими тугоплавкие металлы. Выявленные закономерности формирования неоднородных структур и условий, способствующих зарождению нитевидных образований, открывают возможности для целенаправленного синтеза композиционных материалов с улучшенными механическими и термостойкими свойствами. Такие материалы могут найти применение в аэрокосмической, оборонной и энергетической отраслях, где требуется устойчивость к экстремальным термомеханическим воздействиям.

Перспективными направлениями дальнейших исследований являются:

- оптимизация состава и архитектуры синтактических пен с вольфрамовыми включениями;
- изучение влияния скорости охлаждения и легирования на кинетику формирования наноструктур;
- экспериментальная верификация численных результатов с использованием методов высокоскоростной диагностики и электронной микроскопии.

### **5.3.2 Моделирование воздействия РЭП на гетерогенный материал**

Было проведено комплексное моделирование разрушения макроскопического образца синтактной пены на подложке из алюминия под действием релятивистского электронного пучка. Дисперсный наполнитель имеет сферическую форму диаметром  $d = 300$  мкм. Массовая доля микросфер 20%, распределение наполнителя стохастическое, равномерно по объему связующего из эпоксидной смолы. Прочностные характеристики микросфер

соответствуют расчету раздела 5.3.1. Образец окружен с фронтальной и тыльной стороны фоновой разреженной средой. Мишень подвергается воздействию РЭП (флюенс энергии  $210 \text{ Дж/см}^2$ , длительность 10 нс). Время расчета 0.5 мкс. Энерговклад в материал был рассчитан с помощью программы для моделирования переноса излучения в гетерогенных материалах [99]. Геометрия модели и схема расчёта представлены на рис. 5.16. Численное моделирование проводилось на гибридной сетке, сочетающей тетраэдрические и призматические элементы, общее количество которых составило  $1,7 \cdot 10^7$ . Расчет проведен на суперкомпьютере К60 (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).

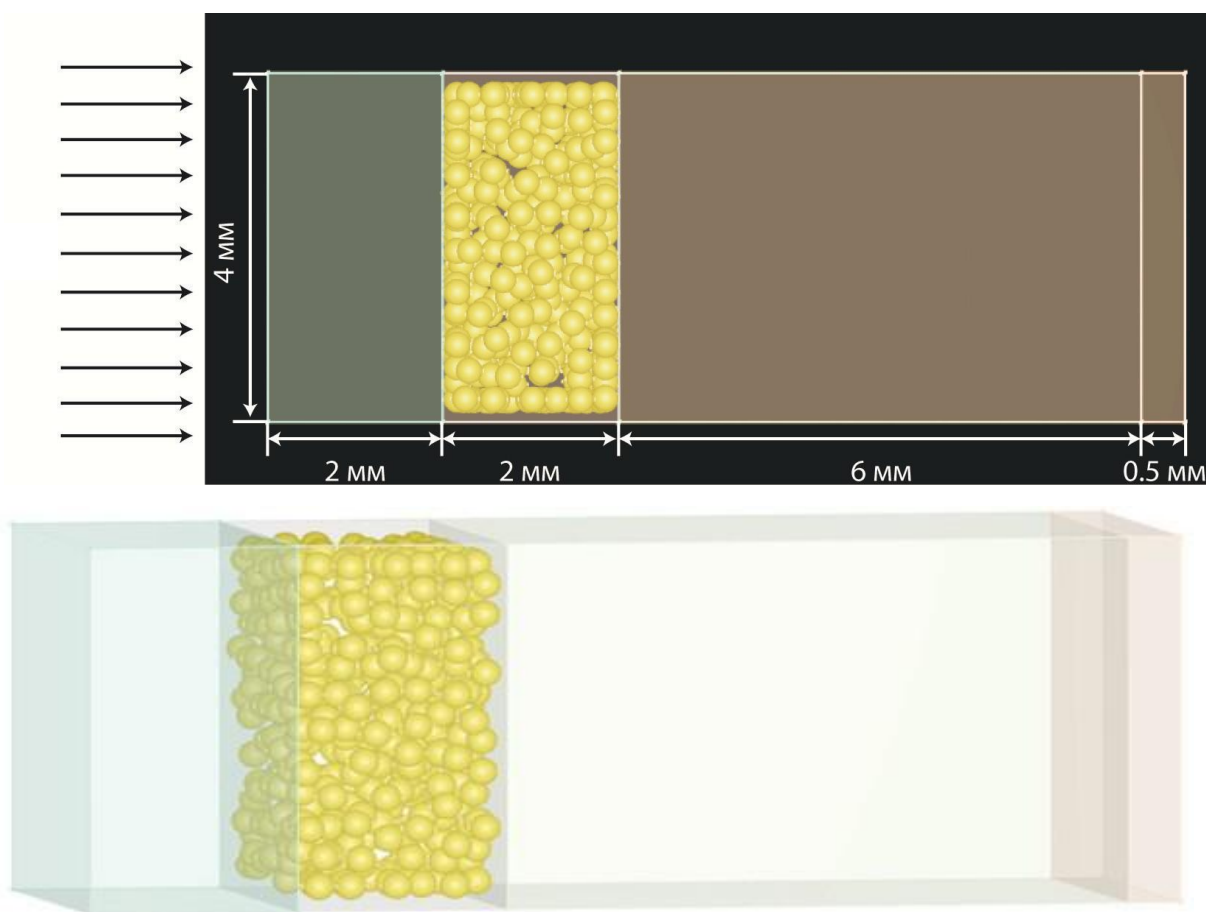


Рис. 5.16. Схема численного эксперимента и геометрия гетерогенного образца.

### *Результаты и обсуждение*

Анализ результатов моделирования (рис. 5.17–5.23) показывает, что воздействие РЭП вызывает интенсивную абляцию поверхностных слоёв материала. Наличие стохастически распределённых микросфер приводит к локальному увеличению поглощения энергии по сравнению со структурированными композитами, что усиливает неоднородность термомеханического отклика [107]. Уже на ранней стадии ( $t = 0,3$  мкс) наблюдается формирование зон разрушения как в связующем, так и в подложке, преимущественно в областях повышенного энерговыделения (рис. 5.19).

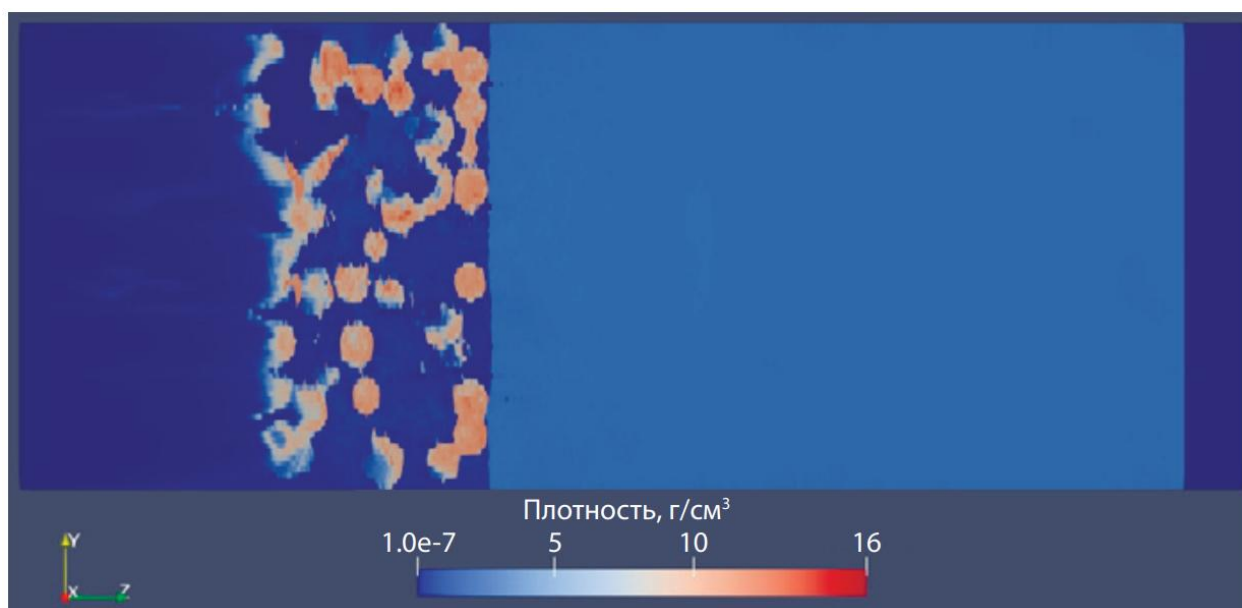


Рис. 5.17. Плотность материала ( $\text{г/см}^3$ ) при  $t = 0,3$  мкс.

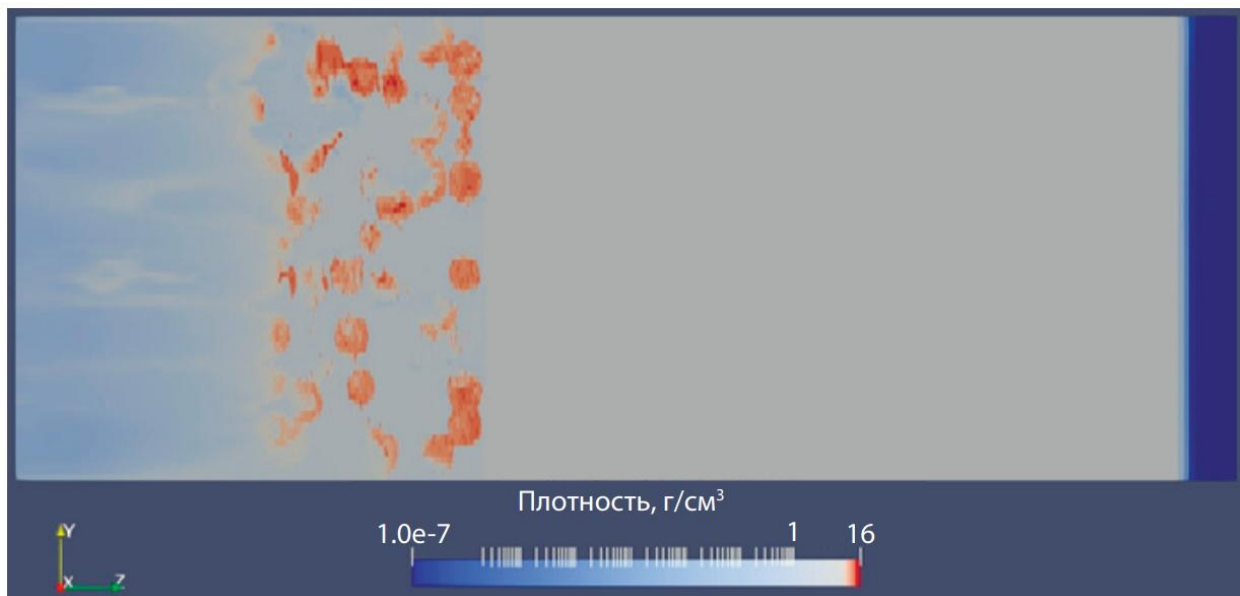


Рис. 5.18. Логарифмическое распределение плотности при  $t = 0,3$  мкс.

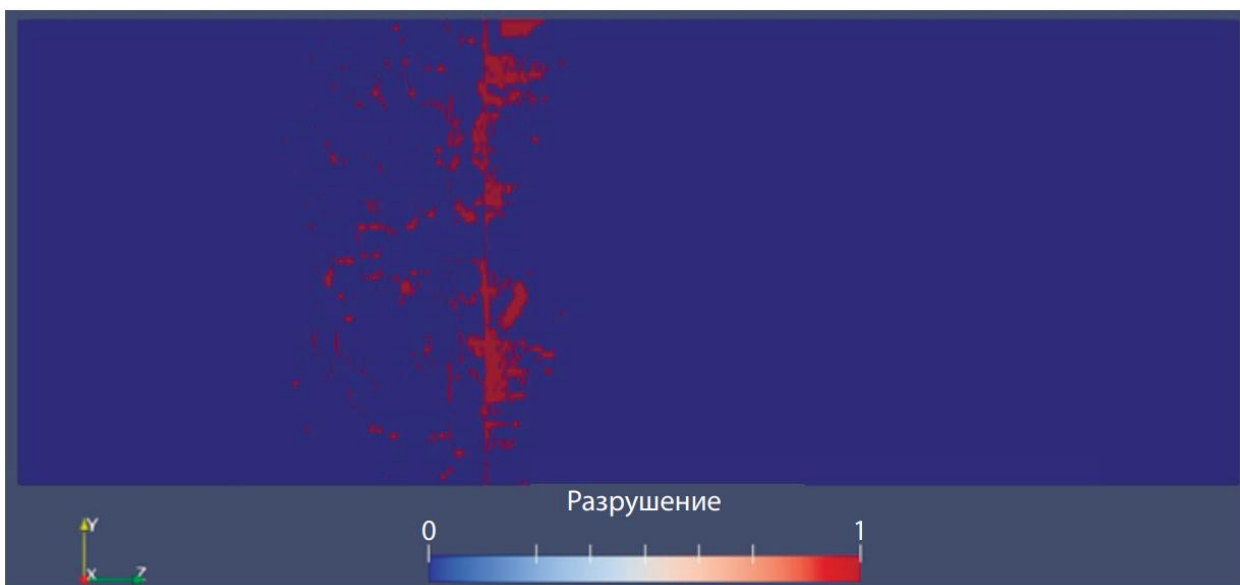


Рис. 5.19. Зоны разрушения образца при  $t = 0,3$  мкс.

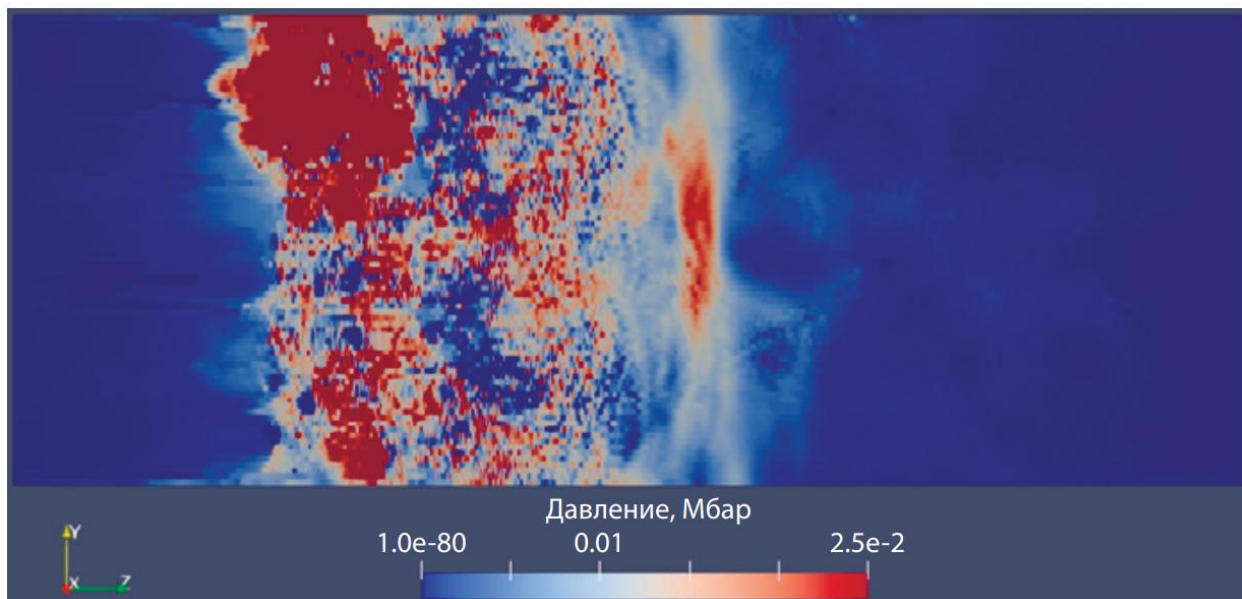


Рис. 5.20. Распределение давления (Мбар) при  $t = 0,3$  мкс.

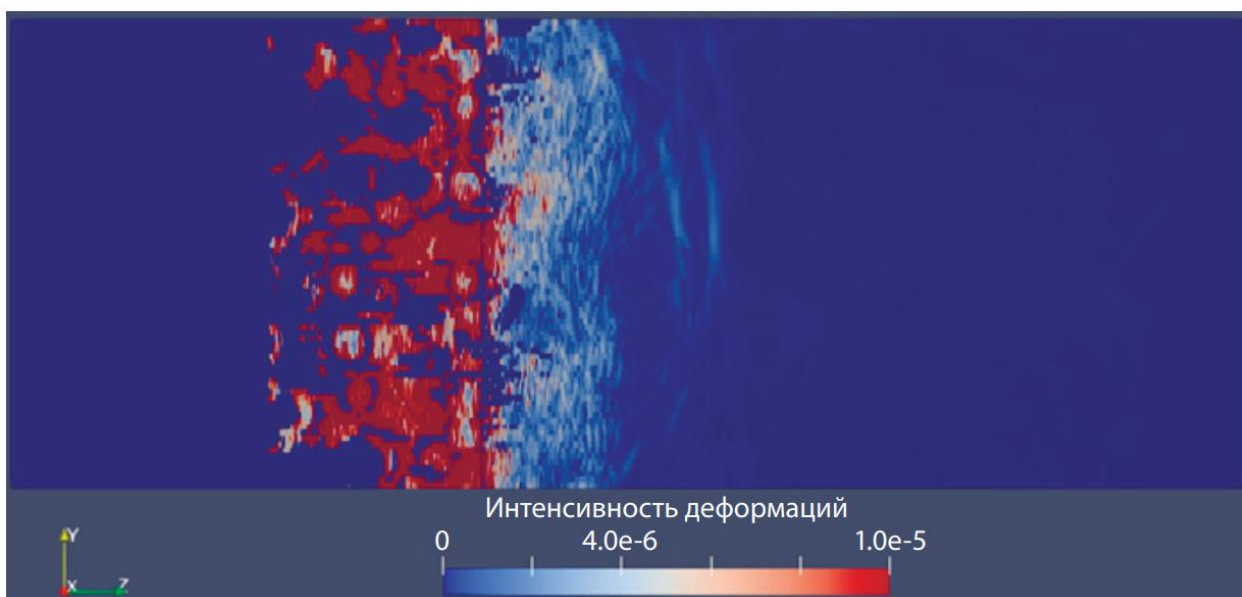


Рис. 5.21. Интенсивность деформаций при  $t = 0,3$  мкс.

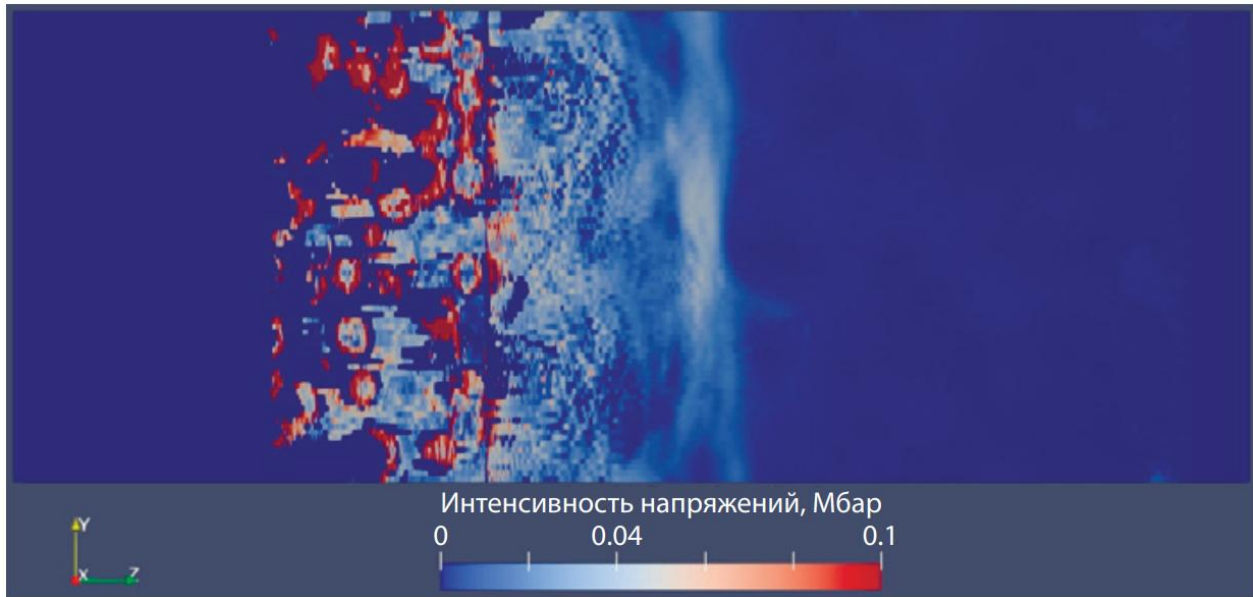


Рис. 5.22. Напряжения (Мбар) при  $t = 0,3$  мкс.

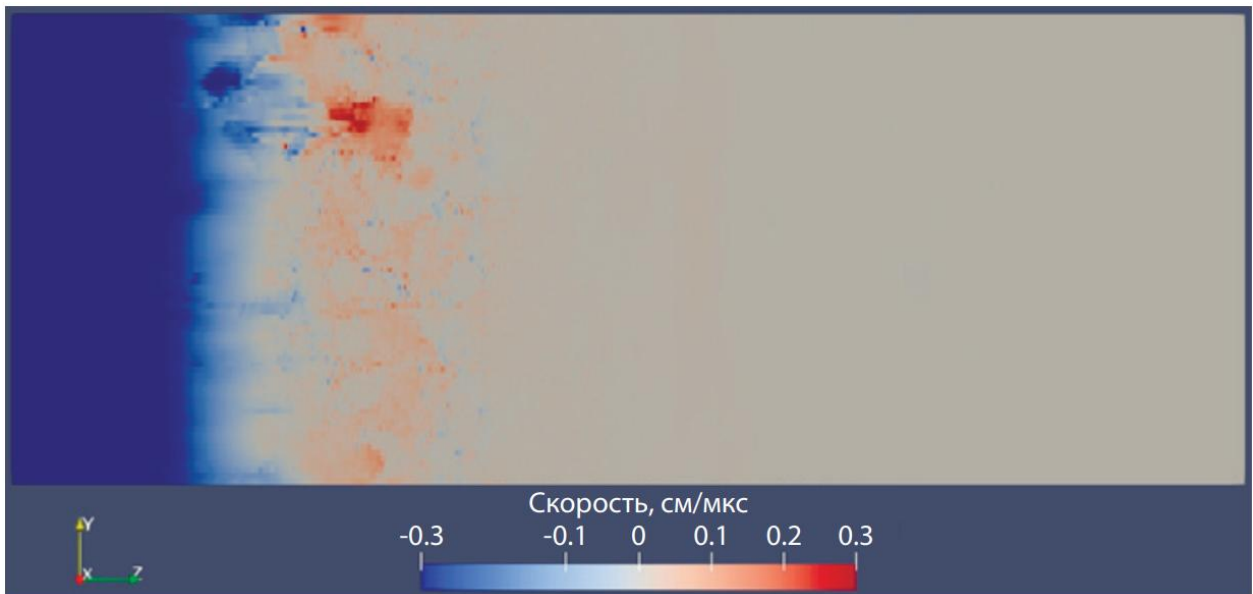


Рис. 5.23. Распределение скорости (см/мкс) при  $t = 0,3$  мкс.

Развитие абляции сопровождается формированием реактивного импульса отдачи и распространением акустической волны в алюминиевой подложке (рис. 5.19). В частицах наполнителя возникают значительные

термоупругие напряжения и деформации (рис. 5.20, 5.21), особенно в приповерхностных слоях, где локализуется основное поглощение энергии излучения. Это приводит к частичному разрушению наполнителя ещё до завершения процесса абляции. Распределение скоростей (рис. 5.22) демонстрирует неоднородный характер отдачи, обусловленный стохастической структурой композита.

### ***Выводы***

Стохастическое распределение дисперсного наполнителя усиливает локальное поглощение энергии, что приводит к неоднородному термомеханическому отклику композита.

Основные зоны разрушения формируются вблизи границ раздела «наполнитель–связующее» и в подложке, где концентрируются напряжения и деформации.

Процесс абляции сопровождается генерацией импульса отдачи и распространением ударной волны в подложке, что может оказывать существенное влияние на целостность конструкции при кратковременном высокоинтенсивном облучении.

Полученные результаты открывают ряд перспективных направлений для дальнейших исследований:

- Оптимизация микроструктуры композита. Целенаправленное управление пространственным распределением наполнителя (например, градиентное или кластерное размещение) может позволить снизить локальные пики поглощения энергии и повысить устойчивость материала к абляции. Это особенно актуально для защиты космических аппаратов и элементов ядерных установок [108].
- Исследование влияния формы и состава наполнителя.

Перспективным представляется моделирование систем с несферическими частицами (нанопластины, нанотрубки) или композитными наполнителями (например,  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), обладающими повышенной термостойкостью и контролируемым коэффициентом поглощения излучения [109].

Эти направления позволят не только углубить фундаментальное понимание взаимодействия ионизирующих излучений с гетерогенными средами, но и заложить основы для разработки радиационно-стойких композитных материалов нового поколения.

#### **5.4 Выводы по Главе 5**

С использованием разработанной численной методики и созданных программных средств проведено численное исследование ряда практически важных задач, связанных с изучением разрушения материалов под действием РЭП. Выполненные расчеты продемонстрировали адекватность построенной модели и эффективность предложенных подходов к совместному моделированию гидродинамических и упругопластических процессов. Сравнение с данными экспериментов НИЦ КИ подтвердило достоверность полученных результатов.

Моделирование воздействия РЭП на эпоксидную смолу, для которой имеется большой объем экспериментальных количественных данных, было чрезвычайно полезно для верификации модели, калибровки широкодиапазонные УРС и уточнения критериев разрушения.

Моделирование многослойной конструкции позволило изучить процессы, приводящие к ее разрушению, и показало, что сквозное моделирование применяется для оптимизации слоистых конструкций и для микромеханического анализа слоистых композитов.

Выполнено моделирование процесса формирования разрушения в полимерном сферопластике, со связующим из эпоксидной смолы и наполнителем в виде стеклянных микросфер, поверхность которых модифицирована вольфрамом. Предложен и реализован алгоритм расчета, включающий расчет НДС для отдельного сферического элемента, нагруженного волной давления, определение для него предела прочности, и комплексное моделирование разрушения гетерогенного образца на подложке из алюминия под действием релятивистского электронного пучка.

Изучение процесса взаимодействия ударных волн при коллапсе микросферы, содержащей вольфрам, в полимерной матрице позволило установить, что вольфрам, благодаря своим уникальным свойствам (высокая плотность, тугоплавкость и прочность), существенно влияет на устойчивость сферопластика к деформации и разрушению. Взаимодействие ударных волн с материалом приводит к сложным процессам на микро- и наноуровне, включая локальное нагревание, пластическую деформацию и фазовые превращения.

Результаты данной главы опубликованы в работах:

1. Марков М.Б., Садовничий Д.Н., Ольховская О.Г., **Бойков Д.С.**, Гасилов В.А., Поляков С.В., Грушин А.С. Динамика микросферы с двухслойной оболочкой в полимерном связующем при действии ударной волны // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2025. № 26. С. 1-19. (**перечень ВАК, РИНЦ**)
2. **Бойков Д. С.** Сквозной расчет термомеханических процессов в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Математическое моделирование. 2024. Т. 36. № 4. С. 166-182. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2024-04-11](https://doi.org/10.20948/mm-2024-04-11)
3. **Бойков Д. С.** Сквозной расчет термомеханических явлений в твердом теле с динамическим контролем агрегатного состояния // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 56. С. 1-18. (**перечень ВАК, РИНЦ**) DOI: [10.20948/prepr-2023-56](https://doi.org/10.20948/prepr-2023-56)

4. **Бойков Д. С.**, Ольховская О. Г., Гасилов В. А. Моделирование газодинамических и упругопластических явлений при интенсивном энергокладе в твердый материал // Математическое моделирование. 2021. Т. 33. № 12. С. 82-102. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2021-12-06](https://doi.org/10.20948/mm-2021-12-06)
5. Егорова В. А., Воронин Ф. Н., Жуковский М. Е., Марков М. Б., Потапенко А. И., Усков Р. В., **Бойков Д. С.** Модель радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных мелкодисперсных материалах // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 1. С. 85-99. (**перечень ВАК, Scopus**) DOI: [10.20948/mm-2020-01-06](https://doi.org/10.20948/mm-2020-01-06)

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Основные результаты диссертационной работы следующие:

Разработана комплексная компьютерная модель термомеханических явлений в твердом деформируемом материале в результате действия интенсивных потоков энергии. Новизна предлагаемого подхода заключается в согласованном расчете газодинамических процессов в испаренном материале, упругих деформаций, пластических течений, объемного разрушения материала и откольных явлений без разделения решения на отдельные задачи. Выбраны материальные уравнения и критерии изменения состояния материала, замыкающие модель и обеспечивающие возможность сквозного расчета.

Разработан алгоритм сквозного расчета нагрева, испарения, динамики испаренного вещества и упругопластических волновых процессов, приводящих к разрушениям в неиспаренном твердом материале, основанный на методике динамического контроля изменения агрегатного состояния конденсированной среды с выбором соответствующего уравнения состояния и формы тензора напряжений и описания многокомпонентных многофазных течений в терминах плотностей компонент среды.

Создано новое программное обеспечение, позволяющее проводить массовые вычислительные эксперименты в области исследования свойств материалов при интенсивных энергетических воздействиях. Разработанный алгоритм согласованного решения задач гидродинамики и упругопластики реализован в виде предметно-ориентированной версии кода, включенной в состав вычислительной платформы MARPLE. Вычислительная платформа MARPLE интегрирована в цифровую платформу для решения сложных мультифизических задач KIAM Digital Tool.

Проведены вычислительные эксперименты с целью изучения разрушения полимерных и композиционных материалов под действием ионизирующих излучений, получены оценки прочностных свойств исследованных материалов.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. *Кербер М. Л.* Полимерные композиционные материалы. Структура. Свойства. Технологии. – Спб.: Профессия, 2011. – 560 с.
2. *Буланов И. М., Воробей В. В.* Технология ракетных и авиакосмических конструкций из композиционных материалов. Учеб. для вузов. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1998. – 516 с.
3. *Flower H. M., Soutis C.* Materials for airframes // *Aeronautical Journal*. – 2003. – Vol. 107, no. 1072. – P. 331–341.
4. *Глазунов А. М., Мозырев А. Г., Жданович М. Ф., Майорова О. О.* Полимерные и композитные материалы в конструкции магистральных нефтепроводов на участках с многолетнемерзлыми грунтами // *Neftegaz.RU* №2 (158), 2025 <https://magazine.neftegaz.ru/archive/879069/>
5. *Demidov B. A., Efremov V. P., Kalinin Yu. G., Kazakov E. D., Metelkin S. Yu., Petrov V. A., Potapenko A. I.* // *Journal of Physics: Conference Series*. 2015 V. 653, Iss. 1, 012009
6. *Гуревич М.И., Казаков Е.Д., Калинин Ю.Г., Курило А.А., Тельковская О.В., Чукбар К.В.* О разрушении упругих полимерных материалов под воздействием электронного пучка // *Журнал технической физики*. 2021. Т. 91. № 11. С. 1655-1661. DOI: 10.21883/JTF.2021.11.51525.346-20
7. *Уткин А. В., Мочалова В. М., Якушев В. В., Рыкова В. Е., Шакула М. Ю., Острик А. В., Ким В. В., Ломоносов И. В.* Импульсное сжатие и растяжение композитов при ударно-волновом воздействии, *ТВТ*, 2021, том 59, выпуск 2, 189–194 DOI: <https://doi.org/10.31857/S0040364421020137>
8. *Канель Г. И., Разоренов С. В., Фортон В. Е.* Волны разрушения в ударно-сжатом стекле // *Успехи механики*. — 2005. — Т. 3, № 3. — С. 3—5.
9. *Бушман А. В. и др.* Исследование плексигласа и тефлона в волнах повторного ударного сжатия и изоэнтропической разгрузки // *Поведение веществ под воздействием сильных ударных волн: сборник научных статей в 4 томах :*

Том 4, С. 273 / ред.: Р. Ф. Трунин . — Саров, ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ".— 2007 .— 646 с.

10. *Иногамов Н. А., Петров Ю. В., Хохлов В. А., Жаховский В. В.* Лазерная абляция: физические представления и приложения (обзор) // Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58. № 4. С. 689-706. DOI: 10.31857/S0040364420040043
11. *Малинский Т. В., Роголин В. Е.* Предпороговые эффекты при воздействии ультрафиолетовых лазерных импульсов на медь и ее сплавы // Журнал технической физики, 2022, том 92, вып. 2, С. 269 - 273 DOI: 10.21883/JTF.2022.02.52016.225-21
12. *Казаков Е.Д., Калинин Ю.Г., Крутиков Д.И., Курило А.А., Орлов М.Ю., Стрижаков М.Г., Ткаченко С.И., Шашков А.Ю.* Методы лазерной теневой фотографии с электронно-оптической регистрацией в хронографическом режиме для исследования динамики плазмы в диоде генератора РЭП // Физика плазмы. 2021. Т. 47. № 8. С. 716-727. DOI: 10.31857/S0367292121080060
13. *Демидов Б. А., Казаков Е. Д., Курило А. А., Потапенко А. И., Метёлкин С. Ю., Ульяненок Р. В.* устройство для измерения механического импульса отдачи // Патент на полезную модель RU 190946 U1, 17.07.2019. Заявка № 2019112576 от 24.04.2019.
14. *Демидов Б.А., Казаков Е.Д., Калинин Ю.Г., Крутиков Д.И., Курило А.А., Орлов М.Ю., Стрижаков М.Г., Ткаченко С.И., Чукбар К.В., Шашков А.Ю.* Применение лазерной теневой фотографии с электронно-оптической регистрацией в хронографическом режиме для исследования динамики ударных волн в прозрачных материалах // Приборы и техника эксперимента. 2020. № 3. С. 90-95.
15. *Демидов Б. А., Ефремов В. П., Петров В. А., Мещеряков А. Н.* Динамика объемного разрушения прозрачных диэлектрических полимерных

материалов при импульсном воздействии сильнофокусированного электронного пучка // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 9. С. 18-23.

16. Демидов Б. А., Ефремов В. П., Ивкин М. В., Петров В. А., Мецераков А. Н. Динамика процесса взаимодействия сильнофокусированного импульсного электронного пучка с полимерными материалами // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2008. № 8. С. 55-60.
17. Demidov B. A., Kazakov E. D., Kurilo A. A. Experimental Determination of the Spallation Strength of Polymer Materials // Physics of Atomic Nuclei. 2024. Т. 87. № S1. С. S252-S255. DOI: 10.1134/S106377882413026X
18. Казаков Е. Д., Орлов М. Ю., Павленко М. И., Стрижаков М. Г. Экспериментальное исследование воздействия сильнофокусированных электронных пучков на многослойные мишени // В сборнике: Лазерные, плазменные исследования и технологии. ЛАПЛАЗ-2022. Сборник научных трудов VIII Международной конференции, посвященной 100-летию со дня рождения лауреата нобелевской премии по физике Басова Николая Геннадиевича. Москва, 2022. С. 176
19. Панин В. Ф., Гладков Ю. А. Конструкции с наполнителем. Справочник. М.: Машиностроение. — 1991.
20. Острик А. В. Прогнозирование защитных свойств покрытий из сферопластиков при воздействии высокоинтенсивных потоков ионизирующего излучения // Деформация и разрушение материалов. — 2010. — № 2. — С. 36-43.
21. Мерзиевский Л. А., Реснянский А. Д. О моделировании динамического деформирования сферопластика // Физика горения и взрыва. — 1992. — Т. 28. — № 3. — С.119-121.
22. Viot P., Shankar K., Bernard D. Effect of strain rate and density on dynamic

- behaviour of syntactic foam // *Composite Structures*. — 2008. — V. 86. — № 4. — p. 314–327.
23. *Димитриенко Ю. И., Сборщиков С. В., Соколов А. П., Гафаров Б. Р., Садовничий Д. Н.* Численное и экспериментальное моделирование прочностных характеристик сферопластиков // *Композиты и наноструктуры*. — 2013. — № 3. — С. 35-51.
24. *Квасов И. Е., Левянт В. Б., Петров И. Б.* Численное исследование волновых процессов в пористой среде с использованием сеточнохарактеристического метода // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. — 2016. — том 56. — № 9. — С. 1645–1656  
DOI: 10.7868/S004446691609012X
25. *Медведев А. Б., Трунин Р. Ф.* Ударное сжатие пористых металлов и силикатов // *Успехи физических наук*. — 2012. — Т. 182. — № 8. — С. 829–846.  
<https://doi.org/10.3367/UFNr.0182.201208b.0829>
26. *Meng X.-F., Shen X.-Q., Liu W.* // *Appl. Surf. Sci.* 2012. — Vol. 258. — N 7. — p. 2627–2631.
27. *Караханов С. М., Пластинин А. В., Бордзиловский Д. С., Бордзиловский С. А.* Время формирования горячих точек при ударном сжатии микробаллонов в конденсированной среде // *Физика горения и взрыва*. — 2016. — Т. 52, — № 3. — С. 105–113.
28. *Dattelbaum D. M., Coe J. D.* Shock-driven decomposition of polymers and polymeric foams // *Polymers*. — 2019. — V. 11. — N. 3. — p. 493–516  
<https://doi.org/10.3390/polym11030493>.
29. *Герасимов С. И., Калмыков А. П., Иошлев А. Г., Кузьмин В. А., Маскайкин С. А.* Исследование соударения ударника из пористого вольфрама с комбинированной преградой // *Проблемы прочности и пластичности*. — 2023. — Т. 85, — № 3, — С. 414-425. DOI: 10.32326/1814-9146-2023-85-3-414-425

30. Милехин Ю. М., Садовничий Д. Н., Шереметьев К. Ю., Калинин Ю. Г., Казаков Е. Д., Марков М. Б. Формирование нановискеров наносекундным потоком релятивистских электронов в сферопластике, содержащем вольфрам // Доклады академии наук. — 2019. — Т. 487. — № 2. — С. 159-163.
31. Садовничий Д. Н., Милехин Ю. М., Казаков Е. Д., Марков М. Б., Шереметьев К. Ю. Процессы структурообразования в синтактной пене на основе металлизированных стеклосфер и полисилоксана при воздействии пучка релятивистских электронов с наносекундным фронтом импульса // Известия Академии наук. Серия химическая. — 2023. — Т. 72. — № 9. — С. 2048-2059.
32. Садовничий Д. Н., Милехин Ю. М., Шереметьев К. Ю., Казаков Е. Д., Марков М. Б., Савенков Е. Б. Фазовые превращения и образование нановолокон при воздействии наносекундного пучка релятивистских электронов на синтактные пены с полимерным силоксановым связующим // Журнал прикладной химии. — 2022. — Т. 95. — Вып. 1. — С. 87-99.
33. Садовничий Д. Н., Милехин Ю. М., Малинин С. А., Потапенко А. И., Чепрунов А. А., Ульяненок Р. В., Шереметьев К. Ю., Перцев Н. В., Марков М. Б., Савенков Е. Б. Экспериментальное изучение образования нитевидных структур и свойств сферопластика при ударно-волновом воздействии // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т.57. — Вып.2. — С. 123-131. DOI:10.15372/FGV20210213
34. Петров И. Б., Фаворская А. В. О совместном моделировании волновых явлений сеточно-характеристическим методом и разрывным методом Галеркина // Докл. РАН. Матем., информ., проц. упр., 506 (2022), 62–67 DOI: <https://doi.org/10.31857/S2686954322050150>
35. Грибанов В. М., Острик А. В., Ромадинова Е. А. Численный код для расчета многократного комплексного действия излучений и частиц на многослойный многофункциональный гетерогенный плоский пакет (код «ММНПП-1»). —

Черноголовка: ИПХФ РАН, 2006. – 92 с.

36. Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Косолапов О.А., Кудряшова Т.А., Суков С.А. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2012. – №6 – С. 105-115.
37. ЦКП ИПМ РАН [сайт]. – URL: <https://ckp.kiam.ru/?home> (дата обращения: 14.09.2022).
38. MPI Forum [сайт]. – URL: <https://www.mpi-forum.org/> (дата обращения: 22.10.2025)
39. OpenMP [сайт]. – URL: <https://www.openmp.org/> (дата обращения: 22.10.2025)
40. NVIDIA Developer [сайт]. – URL: <https://developer.nvidia.com/cuda-toolkit> (дата обращения: 22.10.2025)
41. Руководство пользователя системы МВС-1000/К-60 / А.В. Баранов, А.О. Лацис, С.В. Сажин, М.Ю. Храмов. – URL: <https://www.kiam.ru/MVS/documents/k60/userguide.html> (дата обращения: 14.09.2022).
42. Slurm Workload Manager - Documentation [сайт]. – URL: <https://slurm.schedmd.com/documentation.html> (дата обращения: 14.09.2022).
43. Home – Docker [сайт]. – URL: <https://www.docker.com/> (дата обращения: 14.09.2022).
44. Kubernetes Production-Grade Container Orchestration [сайт]. – Режим доступа: <https://kubernetes.io/> (дата обращения: 14.09.2022).
45. Службы облачных вычислений | Microsoft Azure [сайт]. – URL: <https://azure.microsoft.com/ru-ru/> (дата обращения: 14.09.2022).
46. Сервисы облачных вычислений – Amazon Web Services (AWS) [сайт]. – URL: <https://aws.amazon.com/ru/> (дата обращения: 14.09.2022).
47. Надежное облако для вашего бизнеса – Yandex Cloud [сайт]. – URL: <https://cloud.yandex.ru/> (дата обращения: 14.09.2022).

48. *É. Markiewicz, B. Langrand, D. Notta-Cuvier* A review of characterisation and parameters identification of materials constitutive and damage models: From normalised direct approach to most advanced inverse problem resolution // International Journal of Impact Engineering Volume 110, December 2017, Pages 371-381 DOI:[10.1016/j.ijimpeng.2017.01.028](https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2017.01.028)
49. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды. 2 изд. М.:Наука, 1973. Т. 1–2.
50. *Бакулин В.Н., Острик А.В.* Комплексное действие излучений и частиц на тонкостенные конструкции с гетерогенными покрытиями. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2015, 288 с.
51. *Новацкий В. К.* Теория упругости. — М.:Мир, 1975.
52. *Гасилов В.А., Дьяченко С.В.* Квазимонотонная двумерная схема мгд для неструктурированных сеток //Математическое моделирование. 2005. Т. 17. № 12. С. 87-109
53. *Olkhovskaya O.G* Projection-Grid Schemes on Irregular Grids for a Parabolic Equation.// Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2023. Т. 63. № 12. С. 2435-2450. DOI: 10.1134/s0965542523120175
54. *Самарский А.А., Попов Ю.П.* РАЗНОСТНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ (Изд. 5-е) Москва, Либроком, 2016, 424 с.
55. *Вязников К.В., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П.* Построение монотонных разностных схем повышенного порядка аппроксимации для систем уравнений гиперболического типа // Математическое моделирование. 1989. Т.1, №5, С. 95-120.
56. *И.М. Куликов, Д.А. Караваяев.* Использование схемы Лакса–Фридрикса с малой диссипацией для моделирования релятивистских течений газа - Сибирский журнал вычислительной математики. 2023. Т.26, N4, с.389-400.
57. *Shu C. W., Osher S.* Efficient Implementation of Essentially Non-Oscillatory Shock Capturing Schemes // Journal of Computational Physics. 1988. V. 77, № 2, P. 439-471. 10.1016/0021-9991(88)90177-5, *Osher S., Shu C.* Efficient

- implementation of essentially non-oscillatory shock- capturing schemes, II // J. Comput. Phys. 1989. Vol. 83, N1, P. 32-78. Doi: 10.1016/0021-9991(89)90222-2
58. *Liu X.D., Osher S., Chan T.* Weighted essentially non-oscillatory schemes // J. Comp. Phys.. 1994. V. 115, №1, P. 200-212. Doi: 10.1006/JCPH.1994.1187
59. *Gasilov V.A., Boldarev A.S., Olkhovskaya O.G., Boykov D.S., Sharova Yu.S., Savenko N.O., Kotelnikov A.M.* MARPLE: SOFTWARE FOR MULTIPHYSICS MODELLING IN CONTINUOUS MEDIA // Numerical Methods and Programming. 2023. Т. 24. № 4. С. 316-338. DOI: 10.26089/NumMet.v24r423
60. *Нукифоров А.Ф., Уваров В.Б., Новиков В.Г.* Квантово-Статистические Модели Высокотемпературной Плазмы и Методы Расчёта Росселандовых Пробега и Уравнений Состояния. М.: Физматлит; 2000.
61. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. THERMOS: Библиотека функций для расчета радиационных и термодинамических свойств различных веществ и смесей в широкой области температур и плотностей / *Новиков В. Г., Соломянная А. Д., Вичев И. Ю., Грушин А. С.*; правообладатель ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. – № 2013616315; заявл. 27.05.2013; зарег. 03.07.2013
62. *Куропатенко В. Ф.* Модели механики сплошных сред – Челябинск: Челяб. гос. ун-т, 2007. - 303с.
63. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды. – 2 изд. – М.:Наука, 1973. – Т. 1–2.
64. *More R. M., Warren K. H., Young D. A., Zimmerman G. B.* // The Physics of Fluids 31, 3059 (1988); <https://doi.org/10.1063/1.866963>
65. *Faik S. , Tauschwitz A. , Iosilevskiy I.* The equation of state package FEOS for high energy density matter // Computer Physics Communications Volume 227, June 2018, Pages 117-125 <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.01.008>
66. *Гасилов В. А., Грушин А. С., Ермаков А. С., Ольховская О. Г. Петров И. Б.* Моделирование разрушения полимерных материалов под действием интенсивных потоков энергии, Матем. моделирование, 30:7 (2018), 61–78.

DOI: 10.31857/S023408790000575-6

67. Сапожников А. Т., Першина А. В. Интерполяционное уравнение состояния в области испарения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. – 1984. Вып. 2 (16). – С. 29-34.
68. Острик А. В., Ромадинова Е. А. Модель уравнения состояния в области существования двухфазной смеси жидкость - пар с учетом метастабильности при низких температурах. // Межотраслевой научно-технический журнал "Конструкции из композиционных материалов", 2004. Вып. 2. С. 42-49.
69. Бабкин А. В., Колпаков В. И., Охитин В. Н., Селиванов В. В. Численные методы в задачах физики быстропротекающих процессов. Прикладная механика сплошных сред, Том 3, Учеб. для вузов. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. – 520 с.
70. Гриневич Д. В., Яковлев Н. О., Славин А. В. Критерии разрушения полимерных композиционных материалов (обзор) // Труды ВИАМ №7 (79) 2019 С. 92-111 doi 10.18577/2307-6046-2019-0-7-92-111
71. Ермаков А. С. Численное решение трёхмерных задач разрушения инженерных конструкций при разных режимах нагружения (дисс. к.ф.-м.н. 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ) НИУ МФТИ, 2015 [https://old.mipt.ru/education/post-graduate/D212.156.05/announcements/Ermakov\\_Aleksey\\_Sergeevich?ysclid=mh8hez0jh9608618091](https://old.mipt.ru/education/post-graduate/D212.156.05/announcements/Ermakov_Aleksey_Sergeevich?ysclid=mh8hez0jh9608618091)
72. Жуковский М. Е., Усков Р. В. Моделирование взаимодействия гамма-излучения с веществом на гибридных вычислительных системах // Мат. модел., 2011, т.23, №7, с.20-32.
73. Жуковский М. Е., Подоляко С. В., Усков Р. В. Моделирование переноса электронов в веществе на гибридных вычислительных системах // Вычислительные методы и программирование, 2011, т.12, №1, с.152–159.

74. *Егорова В. А., Воронин Ф. Н., Жуковский М. Е., Марков М. Б., Потапенко А. И., Усков Р. В., Бойков Д. С.* Модель радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных мелкодисперсных материалах // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 1. С. 85-99. DOI: [10.20948/mm-2020-01-06](https://doi.org/10.20948/mm-2020-01-06)
75. Свидетельство о государственной регистрации № 2025668173 от 11.7.2025 Программа для ЭВМ "Программный комплекс MARPLE версия 2" В.А. Гасилов, Н.О. Савенко, А.М. Котельников, А.С. Болдарев, О.Г. Ольховская, Д.С. Бойков. Правообладатель Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук".
76. *V. Gasilov, S. Dyachenko, O. Olkhovskaya, A. Boldarev, E. Kartasheva, S. Boldyrev* Object-Oriented Programming and Parallel Computing in Radiative Magnetohydrodynamics Simulations // *Advances in Parallel Computing 15*, IOS Press, 2008, 475–482.
77. *Гасилов В. А., Болдарев А. С., Дьяченко С. В. и др.* Пакет прикладных программ MARPLE 3D для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы. // МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2012 год, том 24, номер 1, стр. 55-87.
78. Свидетельство о государственной регистрации № 2012660911 от 30.12.2012 Программа для ЭВМ "Программный комплекс MARPLE" Г.А. Багдасаров, А.С. Болдарев, В.А. Гасилов, С.В. Дьяченко, Е.Л. Карташева, О.Г. Ольховская. Правообладатель Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской Академии Наук.
79. *Буч Г., Рамбо Дж., Джекобсон А.* Язык UML. Руководство пользователя. Пер. с англ. Слинкин А. А., 2-е изд., стер., М.: ДМЛ Пресс, 2004.
80. *Kartasheva E. L. et al.* An Implicit Complexes Framework for Heterogeneous Objects Modelling. in *Heterogeneous Objects Modelling and Applications*

//Lecture Notes in Computer Science, vol. 4889, pp. 1–41, 2008.

81. <http://zlib.net/>
82. <http://salome-platform.org/>
83. *Дьяченко С. В., Гасилова И. В., Дорофеева Е. Ю.* Разработка конвертера данных из интегрированной CAD-CAE системы Salome в прикладной код для численного решения начально-краевых задач методом сеток. // Препринт №. 36 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2012, 25 стр.
84. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis/>
85. <http://www.cs.sandia.gov/CRF/aztec1.html>
86. <https://cmake.org/>
87. *Squillacote A.* ParaView Guide, A Parallel Visualization Application. Kitware Inc., 3rd edition, 2008.
88. *Поляков С. В.* Облачный сервис для решения перспективных задач нанотехнологии / С.В. Поляков, В.О. Подрыга, Д.В. Пузырьков // Научный сервис в сети Интернет: труды XIX Всероссийской научной конференции (18-23 сентября 2017 г., г. Новороссийск). – М.: ИПМ им.М. В. Келдыша, 2017. – С. 379-388. – URL: <http://keldysh.ru/abrau/2017/54.pdf> (дата обращения: 14.09.2022).
89. *Пузырьков Д. В.* Облачный сервис для масштабных молекулярно-динамических расчетов: от идеи до реализации / Д. В. Пузырьков, В. О. Подрыга, С. В. Поляков // Научный сервис в сети Интернет: труды XIX Всероссийской научной конференции (18-23 сентября 2017 г., г. Новороссийск). – М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017. – С. 406-416. – Режим доступа: <http://keldysh.ru/abrau/2017/58.pdf> (дата обращения: 14.09.2022).
90. Sim Streamlined For Design: structural simulation and analysis in the cloud [сайт]. – URL: <https://www.sim4design.com/index> (дата обращения: 14.09.2022).
91. Nucleonica [сайт]. – URL: <https://www.nucleonica.com/> (дата обращения: 14.09.2022).

92. Everest [сайт]. – URL: <http://everest.distcomp.org/> (дата обращения: 14.09.2022).
93. *Sukhoroslov O. A Web-Based Platform for Publication and Distributed Execution of Computing Applications / O. Sukhoroslov, S. Volkov, A. Afanasiev // 14th International Symposium on Parallel and Distributed Computing (ISPDC). IEEE. – 2015. – P. 175-184.*
94. <https://json.org/json-ru.html>
95. <https://json.nlohmann.me/>
96. <http://butunclebob.com/ArticleS.UncleBob.PrinciplesOfOod>
97. *Гамма Э., Хелм Р., Джонсон Р., Влиссидес Дж. Приемы объектно-ориентированного проектирования. Паттерны проектирования: [пер. с англ.] М.: ДМК Пресс, 2010 366 с.*
98. *Ананьев С.С., Багдасаров Г.А., Гасилов В.А., Данько С.А., Демидов Б.А., Казаков Е.Д., Калинин Ю.Г., Курило А.А., Ольховская О.Г., Стрижаков М.Г., Ткаченко С.И. Исследование динамики анодной плазмы при воздействии мощного электронного пучка на эпоксидную смолу // Физика плазмы. 2017. Т. 43. № 7. С. 608-615. DOI: 10.7868/S0367292117070022*
99. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2019612948, 05.03.2019. Заявка № 2019611865 от 26.02.2019 Программа математического моделирования каскадных процессов переноса излучения в гетерогенных материалах сложной геометрической структуры на гибридных вычислительных кластерах / *Марков М.Б., Егорова В.А., Жуковский М.Е., Потапенко А.И., Усков Р.В.*
100. *Янилкин Ю. В., Бондаренко Ю. А., Гончаров Е. А., Гужова А. Р., Колобянин В. Ю., Софронов В. Н., Стаценко В. П. Тесты для гидрокодов, моделирующих ударноволновые течения в многокомпонентных средах: Учебное пособие: в 2 т. / [Ю. В. Янилкин и др.]. — Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2018.*

101. *Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П.* Осреднение процессов в периодических средах: математические задачи механики композиционных материалов / Москва : Наука, 1984. - 352 с.
102. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 2008. 653 с.
103. *Meyers M.A.* Dynamic Behavior of Materials. Wiley, 1994
104. Armstrong R.W., Zerilli F.J. Dislocation mechanics description of the high strain rate deformation of tungsten // Journal of Applied Physics. 1993. Vol. 73, № 6. P. 2773–2781.
105. *Gupta V., Woldesenbet E.* Ballistic impact studies of syntactic foams // Journal of Materials Science. 2004. Vol. 39. P. 1785–1795.
106. Murr L.E. Shock-wave deformation and associated nanostructure formation in metals // Materials Science and Engineering: A. 2008. Vol. 493, № 1–2. P. 3–12.
107. *Канель Г.И., Фортвов В.Е., Разоренов С.В.* Ударные волны в физике конденсированного состояния // Успехи физических наук. 2007. Т. 177. № 8. С. 809-831.
108. *Zaretsky, E. B., & Kanel, G. I.* (2015). Response of heterogeneous materials to intense radiation pulses. Journal of Applied Physics, 118(17), 175901. <https://doi.org/10.1063/1.4935152>
109. *Mayer, P. M., & Rethwisch, D. R.* (2020). Thermomechanical response of polymer-matrix composites to high-energy radiation. Composites Part B: Engineering, 182, 107623. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.107623>