

УДК 519.6:532.5

MSC 35L04, 65C20

## COMPUTATIONAL ALGORITHMS FOR MULTIPHASE HYDRODYNAMICS MODELS AND FILTRATION

G. V. SANDRAKOV

Faculty of Computer Science and Cybernetics, Taras Shevchenko National University of Kyiv,  
Kyiv, Ukraine, E-mail: gsandrako@gmail.com

## ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ АЛГОРИТМИ ДЛЯ МОДЕЛЕЙ БАГАТОФАЗНОЇ ГІДРОДИНАМІКИ ТА ФІЛЬТРАЦІЇ

Г. В. САНДРАКОВ

Факультет комп'ютерних наук та кібернетики, Київський національний університет  
імені Тараса Шевченка, Київ, Україна, E-mail: gsandrako@gmail.com

**ABSTRACT.** Computational algorithms for modeling of multiphase hydrodynamics processes with take of phase transitions will be discussed. The algorithms are based on discretization of conservation laws for mass, momentum, and energy in integral and differential forms. The time and spatial discretization is natural and numerical simulations are realized as direct computer experiments. The experiments are implemented as a computer simulation of the dynamics of a multiphase carrier fluid containing particles that can undergo, for example, graphite–diamond phase transitions and calculations are given. Modification of the algorithms have also been developed to take into account the influence of viscosity when simulating the dynamics of a multiphase fluid in porous media.

**KEYWORDS:** discretization, conservation laws, particle-in-cell, large particles, phase transitions.

**АНОТАЦІЯ.** Розглянуто обчислювальні алгоритми моделювання багатофазних гідродинамічних процесів з урахуванням фазових перетворень. Алгоритми засновані на дискретизації законів збереження маси, імпульсу та енергії в інтегральній та диференціальній формах. Такі часові та просторові дискретизації є природними та чисельне моделювання реалізується у вигляді прямих комп'ютерних експериментів. Ці експерименти реалізовані як комп'ютерне моделювання динаміки багатофазної рідини, що містить частки, які можуть зазнавати фазові перетворення, наприклад, графіт–алмаз. Наведено розрахунки. Також розроблено модифікацію цих алгоритмів для врахування впливу в'язкості при моделюванні динаміки рідини в пористих середовищах.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** дискретизація, закони збереження, частки в комірках, великі частки, фазові перетворення.

ВСТУП

Однією з найцікавіших проблем сучасної науки є розробка математичних моделей і методів дослідження процесів багатофазної гідродинаміки та фільтрації в складних системах. Комп'ютерне моделювання є важливим і часто єдиним інструментом для вирішення таких наукових та інженерних проблем. Математичне і чисельне моделювання також грає важливу роль в розумінні суті явищ і процесів, досліджуваних в сучасній механіці, фізиці і хімії. Вивчення та оптимізація фізико-хімічних процесів, що відбуваються в багатофазних речовинах в області фазових перетворень, вимагають досить точного визначення значень тисків, енергій і швидкостей, що виникають в різних точках цих речовин на відповідні моменти часу. Визначення значень таких величин, можливо на основі чисельного та комп'ютерного моделювання нелінійних процесів багатофазної гідродинаміки та фільтрації, що враховує основні положення теорії фазових перетворень.

Одним із підходів до розробки таких моделей є підхід представлений в монографії [1] та заснований на концепції багатофазних суцільних середовищ. Однак, загальні багатофазні рівняння, що характеризують такі середовища й представлені в [1], не є замкнутими і містять невизначені доданки. Таким чином, на даний момент в літературі практично відсутні замкнуті математичні моделі, що описують процеси з урахуванням фазових перетворень. Задача про побудову загальних моделей, що враховують фазові перетворення, поставлена В. І. Юдовічем як одна з основних задач математичної фізики [2]. Ця проблема не буде вирішена тут, але буде представлено конкретний підхід для розрахунку параметрів багатофазних середовищ в області фазових перетворень. Цей підхід ґрунтується на дискретизації законів збереження маси, імпульсу та енергії, чисельна реалізація якої була представлена у роботах [3] і [4]. Однак, така комп'ютерна реалізація не була стійкою и потребувала значних ресурсів при розрахунках.

Для виправлення цих недоліків була розроблена нова реалізація методу моделювання динаміки багатофазних рідин з урахуванням фазових перетворень. Ця реалізація ґрунтується на результатах робіт [5] і [6], де наведено строгий математичний підхід, що веде до моделей багатофазної гомогенізації для задач дифузії у композитних середовищах. Підхід, який використовує замкнуті рівняння багатофазної гомогенізації для моделювання, був аносований у роботах [7] і [8]. При чисельній реалізації цього методу використовується комбінування відомих методів часток в комірках Харлоу [9], великих часток Білоцерковського [10, 11], гомогенізації (усереднення) Бахвалова [12] та враховані положення теорії фазових перетворень [13, 14]. У наступному параграфі будуть наведені розрахункові формули такого підходу і надалі прокоментовані результати розрахунків та графіки розподілу величин, які добре узгоджуються з експериментальними даними [15, 16].

Методи часток широко використовуються для моделювання динаміки однорідних рідин та плазми [17–21]. Методи часток були узагальнені також до методу згладжених часток для моделювання різноманітних процесів динаміки рідин [22–25]. Приклади розрахунків за такими алгоритмами та докладну бібліографію можна знайти у роботах [21] та [25].

1. МОДЕЛЮВАННЯ БАГАТОФАЗНИХ ПОТОКІВ

Моделювання динаміки багатофазних рідин і матеріалів в області високих тисків, швидкостей та енергій з урахуванням фазових перетворень буде засновано на підставі припущення про локальний збіг тисків у кожній з фаз рідин та дискретизації законів збереження за допомогою гомогенізації на комірках розрахункової сітки [7, 8]. Припущення про локальний збіг тисків є природним, оскільки «при високих тисках властивості твердого тіла наближаються до властивостей рідини, а для сумішей рідин характерний збіг їхніх тисків» ([1], с. 242). Таким чином, розглядається алгоритм моделювання, для якого чисельна дискретизація є природною, і алгоритми розрахунків реалізуються як комп'ютерне моделювання динаміки несучої рідини, що містить частки, які можуть зазнавати фазові перетворення. Ці перетворення моделюються з урахуванням основних положень теорії фазових перетворень та законів термодинаміки [13, 14]. Такий підхід є адекватним фізичній та математичній сутності таких процесів, оскільки закони збереження та термодинаміки залишаються виконаними і на дискретному рівні в рамках прийнятої точності розрахунків.

Чисельна реалізація моделювання динаміки рідин в області високих тисків, швидкостей та енергій з урахуванням фазових перетворень буде представлена надалі, де передбачається, що рідини, які розглядаються, є неоднорідними та нев'язкими. Неоднорідності рідини розглядаються як малі частки однієї рідини розподіленої в іншій (несучій) рідини. Загальне число таких часток може бути досить великим, і ці частки можуть зазнавати фазові перетворення. При проведенні розрахунків використовується комбінування методу часток в комірках [9], методу великих часток [10, 11] та методу гомогенізації [12]. У цих алгоритмах використовуються ейлерів та лагранжів підходи одночасно і розрахунки засновані на дискретизації законів збереження, представлених у наступній інтегральній формі

$$\int_{V(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\tau = - \int_{S(t)} (\rho W) \cdot \eta ds,$$

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho W d\tau = - \int_{S(t)} p \eta ds, \tag{1}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho E d\tau = - \int_{S(t)} (pW) \cdot \eta ds,$$

де  $V(t)$  і  $S(t)$  позначають об'єм і поверхню деякої лагранжевої області рідини,  $\eta$  є зовнішньою нормаллю для такої області,  $p = p(\rho, E)$  та  $\rho, W, E$  позначають шукані невідомі щільність, швидкість і повну енергію, відповідно. У випадку розгляду тривимірної лагранжевої області, швидкість може бути представлена у вигляді  $W = (u, v, w)$ . Як відомо [10, 11] закони збереження (1) є еквівалентними законам збереження маси, моментів і енергії,

що можуть бути представлені у наступній диференціальній формі

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho W) &= 0, \\ \frac{\partial \rho W}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho W \otimes W) + \nabla p &= 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho W E) + \operatorname{div}(pW) &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

де  $W \otimes W$  позначає тензорний квадрат вектора-функції  $W = W(t, x, y, z)$ , заданої в точці  $(x, y, z)$  деякої ейлерової області  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  в момент часу  $t \in [0, T]$  для деякого додатного  $T$ .

Конкретні типи рідин (речовин або матеріалів) визначаються в цих рівняннях через визначення форми рівняння стану, яке може бути подане у вигляді  $p = p(\rho, J)$ , де  $J = E - W^2/2$  позначає внутрішню питому енергію. Надалі, для конкретизації обчислювальних формул припускається слідуєчи [1, 14], що рівняння стану розглянутих рідин мають вигляд

$$p = P(\rho) + \rho \Gamma(\rho) J, \quad (3)$$

де  $P(\rho)$  і  $\Gamma(\rho)$  позначають пружну складову рівняння стану і коефіцієнт Грюнайзена для відповідної рідини, що визначені в [1, 14]. Крім того, коефіцієнт Грюнайзена з (3) задається формулою

$$\Gamma(\rho) = \Gamma_0 + \Gamma_1(\rho/\rho_0), \quad (4)$$

що справедлива для багатьох рідин, металів і продуктів детонації вибухових речовин у широкому діапазоні зміни щільності [1, 14], де  $\rho_0$  позначає початкову щільність, а  $\Gamma_0$  і  $\Gamma_1$  постійні речовини. Припускається також, що

$$P(\rho) = \rho_0 c_0 \gamma^{-1} ((\rho/\rho_0)^\gamma - 1), \quad (5)$$

де  $\rho_0$ ,  $c_0$  і  $\gamma$  є постійними речовини, наприклад, для графіту початкова щільність  $\rho_0 = 2.25 \text{ g/sm}^3$ , для алмазу початкова щільність  $\rho_0 = 3.51 \text{ g/sm}^3$  та інші постійні визначені, наприклад, в [1, 14].

Для просторової дискретизації в чисельних розрахунках область  $\Omega$ , що займана рідиною, розбивається на комірки малого розміру з рівномірними кроками  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  за просторовими змінними. Кожній такій комірці приписується номер  $i, j, k$  та усереднені значення щільності, швидкості, тиску і енергії, які відносяться до центру комірки і позначаються

$$\rho_{ijk}^n, \quad u_{ijk}^n, \quad v_{ijk}^n, \quad w_{ijk}^n, \quad p_{ijk}^n, \quad E_{ijk}^n. \quad (6)$$

Індекс  $n$  у цих позначеннях вказує на номер часового кроку, оскільки розрахунки проводяться крок за кроком з малим часовим інтервалом  $\Delta t$ , починаючи із заданої початкової конфігурації параметрів рідини.

Рідина, що заповнює кожну з таких комірок  $i, j, k$  розглядається як сукупність декількох часток. При цьому, частки, що відповідають несучій рідині, що заповнює комірку з номером  $i, j, k$  розглядаються як об'єднана велика частка (як у методі великих часток [10]), а включення, що відповідають вкрапленням графіту, розглядаються як сукупність малих часток в комірці  $i, j, k$  (як у методі часток в комірках [9, 11]).

Значення щільності, швидкості, тиску і енергії, що приписуються таким великим часткам, відносяться до центру комірки і позначаються

$$\rho_{ijk}^{bn}, \quad u_{ijk}^{bn}, \quad v_{ijk}^{bn}, \quad w_{ijk}^{bn}, \quad p_{ijk}^{bn}, \quad E_{ijk}^{bn}. \quad (7)$$

Система включень, наприклад, графіту перенумеровується та моделюється малими частками. Малим часткам приписуються просторові координати, щільність, тиск, об'єм і внутрішня енергія

$$x_s^n, \quad y_s^n, \quad z_s^n, \quad \rho_s^n, \quad p_s^n, \quad O_s^n, \quad J_s^n. \quad (8)$$

Індекс  $s$  у цих позначеннях відповідає номеру частки й змінюється від одиниці до  $S$ , де  $S$  позначає число всіх часток, що заповнюють область  $\Omega$ . Крім того, кожній частки (у якій може виникнути, наприклад, і алмазна фаза з перебігом часу) на часовому кроці  $n$  приписуються щільність графітової складової, її енергія й об'єм і масова частка вмісту графіту

$$\rho_{gs}^n, \quad J_{gs}^n, \quad O_{gs}^n, \quad W_{gs}^n. \quad (9)$$

За цими величинами для кожної частки з номером  $s$  на часовому кроці  $n$  обчислюються об'єм алмазної складової  $O_{as}^n$  і її щільність  $\rho_{as}^n$  та внутрішня енергія  $J_{as}^n$ . Щільність графітової складової визначається з рівності

$$\rho_{gs}^n O_{gs}^n = \rho_s^n O_s^n W_{gs}^n \quad (10)$$

через масову частку графіту  $W_{gs}^n$ . Передбачається, що графітова й алмазна складові кожної частки мають однакові температуру та тиск. Останнє із цих припущень виражається рівністю

$$P_g(\rho_{gs}^n) + \rho_{gs}^n \Gamma_g(\rho_{gs}^n) J_{gs}^n = P_a(\rho_{as}^n) + \rho_{as}^n \Gamma_a(\rho_{as}^n) J_{as}^n, \quad (11)$$

а припущення про збіг температур такої частки з номером  $s$  має вигляд

$$c_g^{-1}(J_{gs}^n - J_g(\rho_{gs}^n)) = c_a^{-1}(J_{as}^n - J_a(\rho_{as}^n)), \quad (12)$$

де  $c_g$  і  $c_a$  позначають сталі, обумовлені питомою теплоємністю при постійному об'ємі, а  $J_g(\rho_{gs}^n)$  і  $J_a(\rho_{as}^n)$  позначають пружні складові внутрішніх питомих енергій у рівнянні стану для графіту та алмазу.

За умови, що  $O_{gs}^n$ ,  $\rho_{gs}^n$  і  $J_{gs}^n$  задані для частки з номером  $s$  на часовому кроці  $n - 1$ , рівняння (10)–(12) розглядаються як система рівнянь для визначення невідомих  $O_{as}^n$ ,  $\rho_{as}^n$  і  $J_{as}^n$ . Тобто, всі значення з (9) та значення тиску для частки з номером  $s$  на часовому кроці  $n$  є визначеними та можна визначити об'єм і щільність графітових та алмазних складових малих часток, що перебувають в комірці з номером  $i, j, k$  як усереднені значення.

На цьому кроці виникає важлива різниця з методом робіт [3] і [4], де система рівнянь (10)–(12) доповнювалася до системи із шістьох рівнянь для визначення об'єму та щільність графітових і алмазних складових малих часток. Тут використовується тільки три рівняння (10)–(12) для знаходження трьох невідомих  $O_{as}^n$ ,  $\rho_{as}^n$  і  $J_{as}^n$ . Розрахунки за такою модифікацією методу виявляються більш зручними та стійкими при комп'ютерній реалізації.

У якості щільності і внутрішньої енергії для комірки  $i, j, k$  обираються усереднені за складовими такої комірки компонентам значення

$$\rho_{ijk}^n = \frac{\rho_{ijk}^{bn} O_{ijk}^{bn} + \rho_{ijk}^{sn} O_{ijk}^{sn}}{O_{ijk}}, \quad J_{ijk}^n = \frac{\rho_{ijk}^{bn} J_{ijk}^{bn} O_{ijk}^{bn} + \rho_{ijk}^{sn} J_{ijk}^{sn} O_{ijk}^{sn}}{\rho_{ijk}^n O_{ijk}},$$

де, наприклад,  $J_{ijk}^{bn}$  та  $J_{ijk}^{sn}$  позначають внутрішню енергію великої та малої часток у даний час, що завершує опис співвідношень для обчислення усереднених значень і значень, що відносяться до великих і малих часток.

Нарешті, для врахування граничних умов при дискретизації задач (1) та (2), область  $\Omega$  оточується системою фіктивних комірок [10], у яких значення параметрів із (6)–(9) визначаються так, щоб на межі  $\partial\Omega$  виконувалися відповідні межові умови в рамках прийнятої точності, обумовленої величинами  $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t$  та загальним числом малих часток  $S$ .

Чисельні розрахунки проводяться крок за кроком з досить малим часовим інтервалом  $\Delta t$ , починаючи із заданої початкової конфігурації даної неоднорідної рідини, що визначає значення параметрів з (6)–(9) при  $n = 0$ . Відповідний часовий крок переходу з часового шару з номером  $n - 1$  на часовий шар з номером  $n$  для моделювання руху даної неоднорідної рідини із включеннями графіту розбивається на чотири етапи: підготовчий, ейлерів, лагранжів і заключний етапи. Такі етапи співпадають з відповідними етапами роботи [4] з урахуванням, що використовується тільки три рівняння (10)–(12) для знаходження трьох невідомих  $O_{as}^n, \rho_{as}^n$  і  $J_{as}^n$ .

Таким чином, слідуючи [4] із зазначеними змінами, на першому ейлеровому етапі при переході з часового шару з номером  $n - 1$  обчислюються проміжні значення швидкостей і енергії, де припускається відсутність потоку маси часток через межі ейлерових комірок, що відповідає переносу моментів і енергії в кожній коміріці, обумовленому силами тиску відповідно до рівнянь моментів і енергії. При цьому на першому попередньому етапі, внутрішня енергія великих і малих часток, що знаходяться у кожній коміріці, розподіляється між цими частками так, щоб тиск і температура в цій коміріці були рівними у відповідності із (10)–(12). Спочатку обчислюються проміжні значення швидкостей  $\bar{u}_{ijk}^n, \bar{v}_{ijk}^n, \bar{w}_{ijk}^n$ , і енергії  $\bar{E}_{ijk}^n$  для комірки з номером  $i, j, k$  за такими формулами

$$\begin{aligned} \bar{u}_{ijk}^n &= u_{ijk}^n - \frac{p_{i+1,j,k}^n - p_{i-1,j,k}^n}{2 \Delta x} \frac{\Delta t}{\rho_{ijk}^n}, \quad \bar{v}_{ijk}^n = v_{ijk}^n - \frac{p_{i,j+1,k}^n - p_{i,j-1,k}^n}{2 \Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_{ijk}^n}, \\ \bar{w}_{ijk}^n &= w_{ijk}^n - \frac{p_{i,j,k+1}^n - p_{i,j,k-1}^n}{2 \Delta z} \frac{\Delta t}{\rho_{ijk}^n}, \\ \bar{E}_{ijk}^n &= E_{ijk}^n - \frac{p_{i+1/2,j,k}^n u_{i+1/2,j,k}^n - p_{i-1/2,j,k}^n u_{i-1/2,j,k}^n}{\Delta x} \frac{\Delta t}{\rho_{ijk}^n} - \\ &\quad - \frac{p_{i,j+1/2,k}^n v_{i,j+1/2,k}^n - p_{i,j-1/2,k}^n v_{i,j-1/2,k}^n}{\Delta y} \frac{\Delta t}{\rho_{ijk}^n} - \\ &\quad - \frac{p_{i,j,k+1/2}^n w_{i,j,k+1/2}^n - p_{i,j,k-1/2}^n w_{i,j,k-1/2}^n}{\Delta z} \frac{\Delta t}{\rho_{ijk}^n}, \end{aligned} \quad (13)$$

де для обчислення усереднених значень проміжного тиску та швидкостей на відповідних межах комірки використовуються наступні формули

$$\begin{aligned}
 p_{i+1/2,j,k}^n &= \frac{p_{i+1,j,k}^n + p_{i,j,k}^n}{2}, & p_{i-1/2,j,k}^n &= \frac{p_{i,j,k}^n + p_{i-1,j,k}^n}{2}, \\
 u_{i+1/2,j,k}^n &= \frac{u_{i+1,j,k}^n + u_{i,j,k}^n}{2}, & u_{i-1/2,j,k}^n &= \frac{u_{i,j,k}^n + u_{i-1,j,k}^n}{2}, \\
 v_{i+1/2,j,k}^n &= \frac{v_{i+1,j,k}^n + v_{i,j,k}^n}{2}, & v_{i-1/2,j,k}^n &= \frac{v_{i,j,k}^n + v_{i-1,j,k}^n}{2}, \\
 w_{i+1/2,j,k}^n &= \frac{w_{i+1,j,k}^n + w_{i,j,k}^n}{2}, & w_{i-1/2,j,k}^n &= \frac{w_{i,j,k}^n + w_{i-1,j,k}^n}{2}
 \end{aligned} \tag{14}$$

і аналогічні формули використовуються для обчислення значень  $p_{i,j+1/2,k}^n$ ,  $p_{i,j,k+1/2}^n, \dots, w_{i,j-1/2,k}^n, w_{i,j,k-1/2}^n$ , які визначають усереднені значення тиску та швидкостей з (13) на відповідних межах комірки з номером  $i, j, k$ .

На лагранжевому етапі при переході від часового шару  $n$  до шару  $n+1$  використовуються проміжні значення швидкості (14) для обчислення масових потоків  $M_{i+1/2,j,k}^n, M_{i-1/2,j,k}^n, M_{i,j+1/2,k}^n, M_{i,j-1/2,k}^n, M_{i,j,k+1/2}^n$  і  $M_{i,j,k-1/2}^n$  через межі комірки з номером  $i, j, k$  за формулами

$$\begin{aligned}
 M_{i+1/2,j,k}^n &= \bar{\rho}_{i+1/2,j,k}^n \bar{u}_{i+1/2,j,k}^n \Delta y \Delta z \Delta t, \\
 M_{i-1/2,j,k}^n &= \bar{\rho}_{i-1/2,j,k}^n \bar{u}_{i-1/2,j,k}^n \Delta y \Delta z \Delta t, \\
 M_{i,j+1/2,k}^n &= \bar{\rho}_{i,j+1/2,k}^n \bar{v}_{i,j+1/2,k}^n \Delta x \Delta z \Delta t, \\
 M_{i,j-1/2,k}^n &= \bar{\rho}_{i,j-1/2,k}^n \bar{v}_{i,j-1/2,k}^n \Delta x \Delta z \Delta t, \\
 M_{i,j,k+1/2}^n &= \bar{\rho}_{i,j,k+1/2}^n \bar{w}_{i,j,k+1/2}^n \Delta x \Delta y \Delta t, \\
 M_{i,j,k-1/2}^n &= \bar{\rho}_{i,j,k-1/2}^n \bar{w}_{i,j,k-1/2}^n \Delta x \Delta y \Delta t,
 \end{aligned} \tag{15}$$

де проміжні потоки щільності розраховуються за такими формулами

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}_{i+1/2,j,k}^n &= \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{u}_{i+1/2,j,k}^n \geq 0, \\ \rho_{i+1,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{u}_{i+1/2,j,k}^n < 0, \end{cases} \\
 \bar{\rho}_{i-1/2,j,k}^n &= \begin{cases} \rho_{i-1,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{u}_{i-1/2,j,k}^n \geq 0, \\ \rho_{i,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{u}_{i-1/2,j,k}^n < 0, \end{cases} \\
 \bar{\rho}_{i,j+1/2,k}^n &= \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{v}_{i,j+1/2,k}^n \geq 0, \\ \rho_{i,j+1,k}^n, & \text{якщо } \bar{v}_{i,j+1/2,k}^n < 0, \end{cases} \\
 \bar{\rho}_{i,j-1/2,k}^n &= \begin{cases} \rho_{i,j-1,k}^n, & \text{якщо } \bar{v}_{i,j-1/2,k}^n \geq 0, \\ \rho_{i,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{v}_{i,j-1/2,k}^n < 0, \end{cases} \\
 \bar{\rho}_{i,j,k+1/2}^n &= \begin{cases} \rho_{i,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{w}_{i,j,k+1/2}^n \geq 0, \\ \rho_{i,j,k+1}^n, & \text{якщо } \bar{w}_{i,j,k+1/2}^n < 0, \end{cases} \\
 \bar{\rho}_{i,j,k-1/2}^n &= \begin{cases} \rho_{i,j,k-1}^n, & \text{якщо } \bar{w}_{i,j,k-1/2}^n \geq 0, \\ \rho_{i,j,k}^n, & \text{якщо } \bar{w}_{i,j,k-1/2}^n < 0. \end{cases}
 \end{aligned} \tag{16}$$

Таким чином, для розрахунку проміжних потоків (16), які використовуються для обчислення потоків (15) через межі комірки  $i, j, k$ , враховано напрями швидкостей  $\bar{u}_{i+1/2,j,k}^n, \bar{u}_{i-1/2,j,k}^n, \dots, \bar{w}_{i,j,k+1/2}^n, \bar{w}_{i,j,k-1/2}^n$ .

Значення (16) апроксимують масоперенос відповідно до закону збереження маси, що виражається першим рівнянням в (2). Розрахункові формули (13) і (14) фактично є різницевою апроксимацією для решти рівнянь системи (2), які виражають закони збереження імпульсу та енергії, якщо доданки з дивергенцією дорівнюють нулю. Відповідно, апроксимація таких доданків, що визначають передачу імпульсів та енергії, виконується на заключному етапі при переході від часового шару  $n$  до шару  $n+1$ .

На третьому етапі для обчислення остаточних значень параметрів використовуються масові потоки (15), які визначають динаміку рідини на часовому шарі  $n+1$  для комірки з номером  $i, j, k$  за формулами

$$\begin{aligned}
 \rho_{ijk}^{n+1} &= \rho_{ijk}^n - \\
 &- O_{ijk}^{-1} \left( M_{i+1/2,j,k}^n - M_{i-1/2,j,k}^n + M_{i,j+1/2,k}^n - \right. \\
 &\quad \left. - M_{i,j-1/2,k}^n + M_{i,j,k+1/2}^n - M_{i,j,k-1/2}^n \right), \\
 u_{ijk}^{n+1} &= \frac{\rho_{ijk}^n}{\rho_{ijk}^{n+1}} u_{ijk}^n - \\
 &- O_{ijk}^{-1} \left( \bar{u}_{i+1/2,j,k}^n M_{i+1/2,j,k}^n - \bar{u}_{i-1/2,j,k}^n M_{i-1/2,j,k}^n + \bar{u}_{i,j+1/2,k}^n M_{i,j+1/2,k}^n - \right. \\
 &\quad \left. - \bar{u}_{i,j-1/2,k}^n M_{i,j-1/2,k}^n + \bar{u}_{i,j,k+1/2}^n M_{i,j,k+1/2}^n - \bar{u}_{i,j,k-1/2}^n M_{i,j,k-1/2}^n \right), \\
 v_{ijk}^{n+1} &= \frac{\rho_{ijk}^n}{\rho_{ijk}^{n+1}} v_{ijk}^n - \\
 &- O_{ijk}^{-1} \left( \bar{v}_{i+1/2,j,k}^n M_{i+1/2,j,k}^n - \bar{v}_{i-1/2,j,k}^n M_{i-1/2,j,k}^n + \bar{v}_{i,j+1/2,k}^n M_{i,j+1/2,k}^n - \right. \\
 &\quad \left. - \bar{v}_{i,j-1/2,k}^n M_{i,j-1/2,k}^n + \bar{v}_{i,j,k+1/2}^n M_{i,j,k+1/2}^n - \bar{v}_{i,j,k-1/2}^n M_{i,j,k-1/2}^n \right), \\
 w_{ijk}^{n+1} &= \frac{\rho_{ijk}^n}{\rho_{ijk}^{n+1}} w_{ijk}^n - \\
 &- O_{ijk}^{-1} \left( \bar{w}_{i+1/2,j,k}^n M_{i+1/2,j,k}^n - \bar{w}_{i-1/2,j,k}^n M_{i-1/2,j,k}^n + \bar{w}_{i,j+1/2,k}^n M_{i,j+1/2,k}^n - \right. \\
 &\quad \left. - \bar{w}_{i,j-1/2,k}^n M_{i,j-1/2,k}^n + \bar{w}_{i,j,k+1/2}^n M_{i,j,k+1/2}^n - \bar{w}_{i,j,k-1/2}^n M_{i,j,k-1/2}^n \right), \\
 E_{ijk}^{n+1} &= \frac{\rho_{ijk}^n}{\rho_{ijk}^{n+1}} E_{ijk}^n - \\
 &- O_{ijk}^{-1} \left( \bar{E}_{i+1/2,j,k}^n M_{i+1/2,j,k}^n - \bar{E}_{i-1/2,j,k}^n M_{i-1/2,j,k}^n + \bar{E}_{i,j+1/2,k}^n M_{i,j+1/2,k}^n - \right. \\
 &\quad \left. - \bar{E}_{i,j-1/2,k}^n M_{i,j-1/2,k}^n + \bar{E}_{i,j,k+1/2}^n M_{i,j,k+1/2}^n - \bar{E}_{i,j,k-1/2}^n M_{i,j,k-1/2}^n \right),
 \end{aligned} \tag{17}$$

де  $O_{ijk} = \Delta x \Delta y \Delta z$  позначає об'єм комірки та усереднені значення проміжних швидкостей (швидкісні потоки)  $\bar{u}_{i+1/2,j,k}^n, \bar{u}_{i-1/2,j,k}^n, \dots, \bar{w}_{i,j,k-1/2}^n$  обчислюються за формулами, подібними до (15) і (16), в яких  $\rho_{ijk}^n$  слід замінити на  $u_{ijk}^n, v_{ijk}^n, w_{ijk}^n$  відповідно. Аналогічні формули (15) і (16) використовуються для усереднених проміжних енергій  $\bar{E}_{i+1/2,j,k}^n, \dots, \bar{E}_{i,j,k-1/2}^n$ .

На заключному етапі обчислень даної модифікації, приймається в розрахунок рух розглянутих часток під дією обчислених моментів, що відповідає лагранжевому етапу розглянутої апроксимації рівняння збереження маси. На цьому етапі моделюється переміщення часток за час  $\Delta t$  і обчислюються потоки маси і енергії через границі ейлерових комірок.

Нові координати частки з номером  $s$  обчислюються за формулами

$$x_s^{n+1} = x_s^n + u_s^n \Delta t, \quad y_s^{n+1} = y_s^n + v_s^n \Delta t, \quad z_s^{n+1} = z_s^n + w_s^n \Delta t, \quad (18)$$

де швидкість  $u_s^n, v_s^n, w_s^n$  даної частки обчислюється за проміжним значенням швидкостей із використанням лінійної інтерполяції по комірках, що розташовані поблизу комірки з номером  $i, j, k$ . Після порівняння нових координат часток (18) з координатами ейлерових комірок визначається, чи залишилася конкретна частка в колишній комірці або перейшла в сусідню і у яку саме. На основі такого порівняння моделюється перенос маси з деякої конкретної комірки у сусідні комірки, обумовлений рухом малих і великих часток. Для моделювання переносу маси обчислюються попередньо потоки маси через відповідні границі сітки. Крім того, на цьому етапі моделюється перенос енергії з деякої конкретної комірки у сусідні комірки, який обумовлений рухом малих часток через границі комірок. За проміжними значеннями також обчислюються потоки маси через границі комірки з номером  $i, j, k$ , які обумовлені рухом великих часток, відповідно (13) та (14).

На четвертому заключному етапі, потоки маси і відповідні потоки швидкості використовуються для обчислення значень параметрів

$$\rho_{ijk}^{n+1}, \quad u_{ijk}^{n+1}, \quad v_{ijk}^{n+1}, \quad w_{ijk}^{n+1}, \quad p_{ijk}^{n+1}, \quad E_{ijk}^{n+1},$$

які визначають динаміку рідини, на новому часовому шарі для комірки з номером  $i, j, k$ , відповідно (15) та (17). Наведені співвідношення завершують опис алгоритму обчислення всіх значень параметрів з (6)–(9), що описують динаміку розглянутої неоднорідної рідини із включеннями графіту на новому часовому шарі з номером  $n + 1$ .

Важливою відмінністю розглянутої модифікації методу часток від методу робіт [3] і [4] є обчислення перерозподілу усереднених маси і енергії в конкретній комірці на основі рівностей (10)–(12), які виводяться з умови збігу тиску та температури. Такий перерозподіл враховується на попередньому та заключному етапах розрахунків, що суттєво поліпшило чисельну стійкість та зручність алгоритму комп'ютерного моделювання.

## 2. ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ З ФАЗОВИМИ ПЕРЕТВОРЕННЯМИ

Представлений чисельний алгоритм був розроблений для моделювання з урахуванням фазових перетворень наступного фізичного процесу синтезу.

Припустимо, наприклад, що частинки графіту розподілені рівномірно у мідній суміші з концентрацією 20% в металевому циліндрі діаметром два сантиметри та довжиною десять сантиметрів, який розміщений симетрично вдовж осі циліндру вибухової речовини (наприклад, гексогену) діаметром шість сантиметрів та довжиною десять сантиметрів. Такі пристрої є типовими для синтезу штучних алмазів [15, 16, 26].

Детонація вибухової речовини з одного із торців циліндра призводить до горіння цієї речовини і поширенню детонаційної хвилі вздовж осі циліндра. Графіки розподілу тисків та щільності на центральному перерізі циліндра, що змінюються в процесі горіння наведені на рисунках 1 та 2. Розглянутий процес горіння досить швидкоплинний і завершується практично через 20 мікросекунд тобто однієї п'ятдесятої частини секунди. Наведений розподіл щільності нагадує слід, сформований на початку руху ракети, що цілком природно, оскільки і в процесі руху ракети і при детонації циліндра вибухової речовини відбуваються ідентичні процеси горіння.

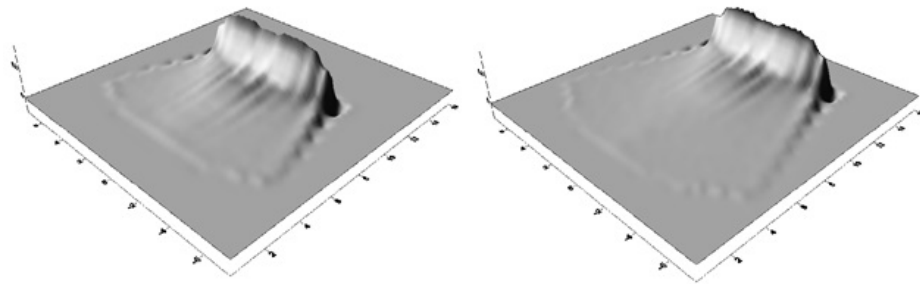


РИС. 1. Розподіл тисків в момент часу 10 та 14 мікросекунд.

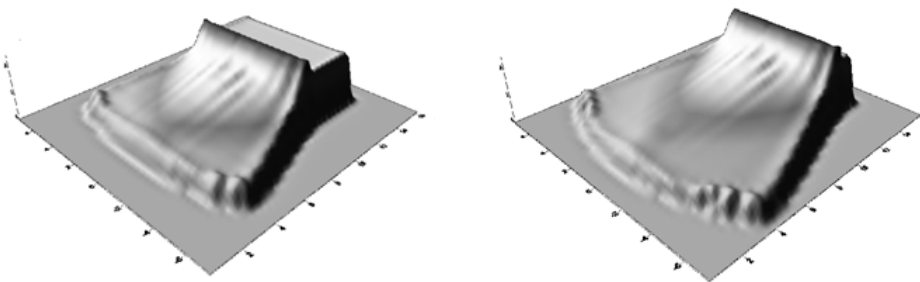


РИС. 2. Розподіл щільності в момент часу 10 та 14 мікросекунд.

Процес горіння вибухової речовини індукує хвилю обтиснення в циліндрі з графітовим порошком. Ця хвиля в свою чергу ініціює конічну хвилю в самому циліндрі з порошком. Зародження і розвиток цієї хвилі, добре ілюструються рисунком 3. Теоретичні побудови форми таких хвиль проведені,

наприклад, в роботі [26] за допомогою методу ударних адіабат. Тут слід зазначити, що метод ударних адіабат має сенс тільки для одновимірних ударних хвиль і використання цього методу для конічних хвиль не цілком коректно. Конічні хвилі, що сходять з зовнішніх меж циліндра з порошком і зображені на рисунку 4, перетинаються через деякий час уздовж осі циліндра та формують кумулятивний (сконцентрований) сплеск або горб, що поширюється уздовж осі, що ясно представлено на рисунках 3 та 4. Формування такого кумулятивного горба типово при зародженні та розвитку динаміки сильних хвиль цунамі. Цей ефект використовується також при розробці кумулятивних снарядів. Теоретичні побудови в роботі [26] не вказують на виникнення кумулятивного ефекту, що занижує практично в три рази максимальні значення температур і тисків представлених в цієї роботі в порівнянні зі значеннями на рисунках 3 та 4. Однак, виникнення кумулятивного ефекту в конічних хвилях відомо та використовується при проектуванні кумулятивних снарядів та розрахунках параметрів хвиль цунамі. Виникнення кумулятивного ефекту в конічних хвилях при моделюванні також відомо та описано, наприклад, в роботі [27], де замість циліндрів розглядаються розрахунки для циліндричних конусів.

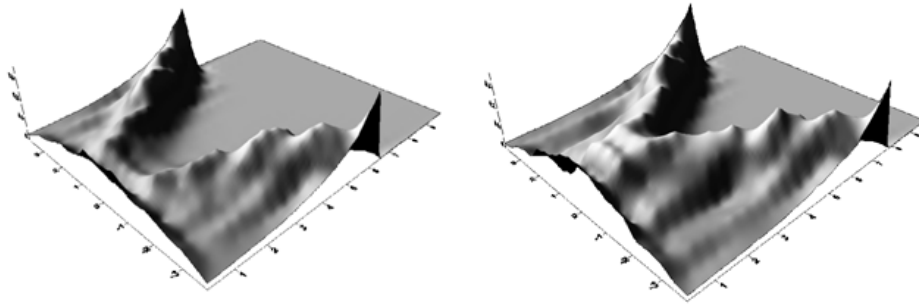


Рис. 3. Розподіл тисків в момент часу 10 та 12 мікросекунд.

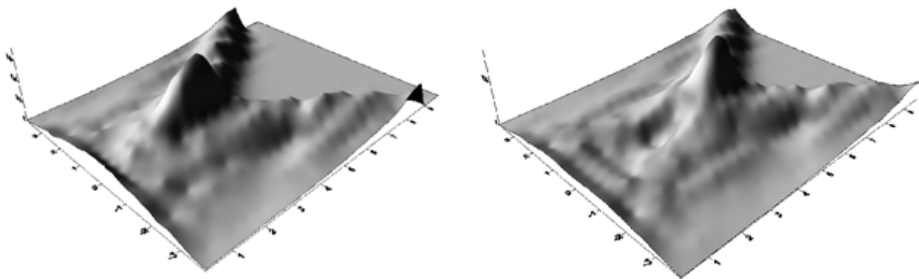


Рис. 4. Розподіл тисків в момент часу 14 та 16 мікросекунд.

Максимальні значення тисків, розподіл яких представлено на останніх рисунках 3 і 4, змінюються з часом від  $p = 40$  ГПа до  $p = 85$  ГПа (з максимумом в момент часу 16 мікросекунд). Аналогічно в цих розрахунках, максимальні значення температур змінюються з часом від  $T = 1800^\circ\text{K}$  до  $T = 3300^\circ\text{K}$ . Таких значень достатньо для фазового перетворення частинок, розташованих поблизу осі циліндра, оскільки типові тиск та температура  $p = 20$  ГПа та  $T = 1500^\circ\text{K}$ , характерні для прямого переходу графіту в алмаз [13, 15]. Теоретичне обґрунтування таких процесів прямих та зворотних фазових переходів наведено, наприклад, в роботі [28].

У результаті проведених розрахунків та комп'ютерних експериментів встановлено, що близько 20% частинок графіту розташованого поблизу осі циліндра переходять в частинки алмазу, що добре узгоджується з відомими експериментальними даними, наведеними в [15] та [16].

Методи часток були узагальнені до методу згладжених (або розмитих) часток [22, 23], щоб моделювати різноманітні проблеми динаміки рідин. Огляд та бібліографія для цього методу наведені в [25]. Цей метод також застосовувався для моделювання багатозазних потоків у [24], де наведено огляд такого застосування методу згладжених часток. Однак у цих роботах не пояснюється, як визначити доданки перерозподілу між фазами, і ці доданки постулюються з фізичних міркувань. Цей підхід неможливо узагальнити на проблеми, в яких допустимі фазові переходи. Цікаво, що цей метод згладжених часток, розроблений початково для задач гідродинаміки, виявився корисним і для моделювання проблем дифузії, теплопровідності та наноматеріалів [29] як метод часток не пов'язаних сіткою.

### 3. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФІЛЬТРАЦІЇ В ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Представлений комбінаційний метод був розроблений для чисельного моделювання швидкоплинних фізичних процесів. Такі процеси відбуваються протягом декількох десятків мікросекунд. Отже, вплив в'язкості був недостатньо значущим при моделюванні таких процесів. Однак цей метод є актуальним також для моделювання процесів, в яких вплив в'язкості є значним. Такі процеси, як правило, не є швидкісними. Крім того, при моделюванні швидкоплинних процесів прийнято вводити «штучну» в'язкість для поліпшення стабільності чисельних алгоритмів [10], що також можна розглядати як моделювання динаміки рідини з урахуванням ефекту в'язкості.

Закопи збереження маси, моментів та енергії для в'язких рідин можна представити відповідно до [10, 30] у такій диференціальній формі

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho W) &= 0, \\ \frac{\partial \rho W}{\partial t} + \text{div}(\rho W \otimes W) + \nabla p &= \\ &= \text{div}(\mu \nabla W) + \nabla((\mu + \lambda) \text{div} W), \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \text{div}(\rho W E) + \text{div}(p W) &= \text{div}(\tau \cdot W) + \text{div}(k \nabla \Theta), \end{aligned} \quad (19)$$

де використовуються позначення для законів збереження з рівнянь (2). Крім того, величина  $\Theta$  є позначенням для температури, яка зазвичай пропорційна внутрішній енергії,  $k$  є коефіцієнтом теплопровідності,  $\mu$  та  $\lambda$  позначають коефіцієнти динамічної та об'ємної в'язкості, які визначаються типом рідини і задовольняють нерівностям  $k > 0$ ,  $\mu > 0$ ,  $2\mu + 3\lambda \geq 0$ .

Відповідно до [30] передбачається, що виконуються рівність  $\lambda = -(2/3)\mu$  та закон стану Стокса, згідно з яким  $\tau = 2\mu D - ((2/3)\mu \operatorname{div} W)I$ , де  $I$  позначає одиничний тензор, а тензор швидкості деформації  $D$  визначаються як напівсума тензора  $\nabla W$  і транспонованого тензора  $(\nabla W)^*$ . Закони збереження маси, моментів та енергії для в'язких рідин в інтегральній формі наведені, наприклад, в монографії [30].

Система рівнянь (19) відрізняється від системи рівнянь (2) лише наявністю доданків, обумовлених в'язкими та тепловими ефектами. Тому усі основні співвідношення представленого методу можуть бути збережені з урахуванням таких доданків на ейлеровому етапі у (13). Наприклад, можна замінити такі доданки неявною різницевою апроксимацією у форми

$$\begin{aligned}
 \bar{u}_{ijk}^n &- \frac{\bar{u}_{i+1,j,k}^n - 2\bar{u}_{i,j,k}^n + \bar{u}_{i-1,j,k}^n}{\rho_{ijk}^n 3 (\Delta x)^2} 4\mu\Delta t - \frac{\bar{u}_{i,j+1,k}^n - 2\bar{u}_{i,j,k}^n + \bar{u}_{i,j-1,k}^n}{\rho_{ijk}^n (\Delta y)^2} \mu\Delta t - \\
 &- \frac{\bar{u}_{i,j,k+1}^n - 2\bar{u}_{i,j,k}^n + \bar{u}_{i,j,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n (\Delta z)^2} \mu\Delta t = u_{ijk}^n - \frac{p_{i+1,j,k}^n - p_{i-1,j,k}^n}{\rho_{ijk}^n 2 \Delta x} \Delta t + \\
 &+ \frac{v_{i+1,j+1,k}^n - v_{i+1,j-1,k}^n - v_{i-1,j+1,k}^n + v_{i-1,j-1,k}^n}{\rho_{ijk}^n 3 \Delta x \Delta y} \mu\Delta t + \\
 &+ \frac{w_{i+1,j,k+1}^n - w_{i+1,j,k-1}^n - w_{i-1,j,k+1}^n + w_{i-1,j,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n 3 \Delta x \Delta z} \mu\Delta t, \\
 \bar{v}_{ijk}^n &- \frac{\bar{v}_{i+1,j,k}^n - 2\bar{v}_{i,j,k}^n + \bar{v}_{i-1,j,k}^n}{\rho_{ijk}^n (\Delta x)^2} \mu\Delta t - \frac{\bar{v}_{i,j+1,k}^n - 2\bar{v}_{i,j,k}^n + \bar{v}_{i,j-1,k}^n}{\rho_{ijk}^n 3 (\Delta y)^2} 4\mu\Delta t - \\
 &- \frac{\bar{v}_{i,j,k+1}^n - 2\bar{v}_{i,j,k}^n + \bar{v}_{i,j,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n (\Delta z)^2} \mu\Delta t = v_{ijk}^n - \frac{p_{i,j+1,k}^n - p_{i,j-1,k}^n}{\rho_{ijk}^n 2 \Delta y} \Delta t + \\
 &+ \frac{u_{i+1,j+1,k}^n - u_{i-1,j+1,k}^n - u_{i+1,j-1,k}^n + u_{i-1,j-1,k}^n}{\rho_{ijk}^n 3 \Delta y \Delta x} \mu\Delta t + \\
 &+ \frac{w_{i,j+1,k+1}^n - w_{i,j+1,k-1}^n - w_{i,j-1,k+1}^n + w_{i,j-1,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n 3 \Delta y \Delta z} \mu\Delta t, \\
 \bar{w}_{ijk}^n &- \frac{\bar{w}_{i+1,j,k}^n - 2\bar{w}_{i,j,k}^n + \bar{w}_{i-1,j,k}^n}{\rho_{ijk}^n (\Delta x)^2} \mu\Delta t - \frac{\bar{w}_{i,j+1,k}^n - 2\bar{w}_{i,j,k}^n + \bar{w}_{i,j-1,k}^n}{\rho_{ijk}^n (\Delta y)^2} \mu\Delta t - \\
 &- \frac{\bar{w}_{i,j,k+1}^n - 2\bar{w}_{i,j,k}^n + \bar{w}_{i,j,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n 3 (\Delta z)^2} 4\mu\Delta t = w_{ijk}^n - \frac{p_{i,j,k+1}^n - p_{i,j,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n 2 \Delta z} \Delta t + \\
 &+ \frac{u_{i+1,j,k+1}^n - u_{i-1,j,k+1}^n - u_{i+1,j,k-1}^n + u_{i-1,j,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n 3 \Delta z \Delta x} \mu\Delta t + \\
 &+ \frac{v_{i,j+1,k+1}^n - v_{i,j-1,k+1}^n - v_{i,j+1,k-1}^n + v_{i,j-1,k-1}^n}{\rho_{ijk}^n 3 \Delta z \Delta y} \mu\Delta t,
 \end{aligned}$$

де передбачається, що коефіцієнт  $\mu$  є сталим. Якщо коефіцієнт ні є сталим, слід використовувати більш складне різницеве наближення. Аналогічні зміни слід внести у співвідношення, що залишилося для  $\bar{E}_{ijk}^n$  у різницевих наближеннях (13), щоб врахувати в'язкі та теплові ефекти.

Використання неявної схеми у такому випадку є природним, оскільки умови стійкості для явних схем є досить жорсткими, наприклад, згідно до [10, 11]. Звичайно, зручніше подати останнє рівняння у (19) у формі

$$\frac{\partial \rho c \Theta}{\partial t} - \operatorname{div}(k \nabla \Theta) = \operatorname{div}(\tau \cdot W) - \operatorname{div}(\rho W E) - \operatorname{div}(p W) - (\rho K)'_t,$$

оскільки внутрішня енергія може бути представлена у вигляді  $J = c \Theta$ , де  $c$  позначає теплоємність при постійному об'єму та  $K = E - J$  це кінетична енергія, яка має вигляд  $K = u^2/2 + v^2/2 + w^2/2$ . Використовуючи такі рівняння, нескладно презентувати неявне наближення для останнього рівняння з (19), яке слід врахувати у наближенні (13).

Отже, практично без зміни представленого методу можна враховувати в'язкі та теплові ефекти при моделюванні процесів у пористому середовищі. Зокрема, на першому ейлеровому етапі вищезазначені співвідношення призводять до неявної схеми та необхідності обертати різницевий оператор для цього наближення. Для обертання такого оператора можуть бути використані добре відомі методи розщеплення. Крім того, для моделювання динаміки багатофазних рідин у пористих середовищах необхідно заморозити частинки, що мають відповідні розміри, наприклад, встановивши  $u_s^n = v_s^n = w_s^n = 0$  у лагранжевому рівнянні динаміки частинок (18).

## Висновки

Таким чином, розроблено нову модифікацію методу чисельного моделювання динаміки багатофазних рідин, речовин та матеріалів в області високих тисків, швидкостей та енергій з урахуванням фазових перетворень на підставі припущення про локальний збіг тисків у кожній з фаз матеріалів та дискретизації законів збереження. Алгоритми розрахунків цього методу реалізуються як комп'ютерне моделювання динаміки багатофазної несучої речовини, що містить частки, які можуть зазнавати фазові перетворення графіт-алмаз. Таки перетворення моделюються з урахуванням основних положень теорії фазових перетворень та законів термодинаміки. Наведено результати розрахунків, що засновані на розробленій чисельній реалізації, та графіки динамічного розподілу шуканих величин тисків і щільності, які добре узгоджуються з експериментальними даними. Розроблено також модифікацію цього методу для урахування ефектів в'язкості при моделюванні динаміки багатофазної рідини в пористих середовищах. Модель руху такої рідини у пористому середовищі отримано при заморожуванні руху частинок відповідного розміру у презентованому методі.

Робота виконана за підтримки Міністерства освіти і науки України: проєкт 0122U002026 та грант Міністерства освіти і науки України на перспективний розвиток наукового напрямку «Математичні науки та природознавство» у Київському національному університеті імені Тараса Шевченка.

## ЛІТЕРАТУРА

1. Nigmatulin R. I. Dynamics of multiphase media. New York: Hemisphere, 1991.
2. Yudovich V. I. Eleven great problems of mathematical hydrodynamics. *Mosc. Math. J.* 2003. Vol. 3. P. 711–737. doi: 10.17323/1609-4514-2003-3-2-711-737
3. Sandrakov G. V., Boyko S. B. Mathematical modeling of complex heterogeneous fluid dynamics. *Journal of Numerical and Applied Mathematics.* 2011. № 1 (104). P. 109–120.
4. Boyko S. B., Sandrakov G. V. Mathematical modeling of phase transitions graphite-diamond dynamics. *Journal of Numerical and Applied Mathematics.* 2012. № 2 (108). P. 88–109.
5. Sandrakov G. V. Multiphase models of nonstationary diffusion arising from homogenization. *Comp. Math and Math Physics.* 2004. Vol. 44(10). P. 1741–1756.
6. Sandrakov G. V. Multiphase homogenized diffusion models for problems with several parameters. *Izvestiya Mathematics.* 2007. Vol. 71(6). P. 1193–1252. doi: 10.1070/IM2007v071n06ABEH002387
7. Sandrakov G. Modeling of heterogeneous hydrodynamics processes with phase transition. *Modeling, Control and Information Technologies.* 2019. Vol. 3. P. 67–68. doi: 10.31713/MCIT.2019.18
8. Sandrakov G. A modified method for modeling of heterogeneous hydrodynamics processes. *Modeling, Control and Information Technologies.* 2020. Vol. 4. P. 63–66. doi: 10.31713/MCIT.2020.06
9. Harlow F. Numerical particles-in-cells method. In: Fundamental methods in hydrodynamics. New York: Academic Press, 1964.
10. Belotserkovskij O. M., Davidov Yu. M. The large particle method in gas dynamics. Moscow: Nauka, 1982.
11. Grigoriev Yu. N., Vshivkov V. A., Fedoruk M. P. Numerical Particle-In-Cell Methods: Theory and Applications. Boston: Utrecht, 2002.
12. Bakhvalov N. S., Panasenko G. Homogenisation: averaging processes in periodic media. Springer Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1989.
13. Мейер К. Физико-механическая кристаллография. М.: Металлургия, 1972.
14. Baum F. A., Orlenko L. P., Stanyukovich K. P., Chelyshev V. P., Shekhter B. I. Physics of an explosion. Moscow: Nauka, 1975.
15. Danilenko V. V. Synthesis and sintering of diamond by explosion. Moscow: Energoatomizdat, 2003.
16. Даниленко В. В. Из истории открытия синтеза наноалмазов. *Физика твердого тела.* 2006. Т. 46:4. С. 581–584.
17. Boyko S. B., Mischenko V. V., Sandrakov G. V. The numerical investigation method for evaporated plasma. *Journal of Numerical and Applied Mathematics.* 2007. № 2 (95). P. 3–12.
18. Dikalyuk A. S. and Kuratov S. E. Numerical modeling of plasma devices by the particle-in-cell method on unstructured grids. *Math. Models and Computer Simulations.* 2018. Vol. 10. P. 198–208.
19. Kormann K., Sonnendrucker E. Energy-conserving time propagation for a structure-preserving particle-in-cell Vlasov-Maxwell solver. *J. Comput. Physics.* 2021. Vol. 425. 109890. doi: 10.1016/j.jcp.2020.109890
20. Wang Z., Qin H., Sturdevant B., Chang C. S. Geometric electrostatic particle-in-cell algorithm on unstructured meshes. *J. Plasma Physics.* 2021. Vol. 87(4). 905870406. doi: 10.1017/S0022377821000702

21. Parreiras E. A., Vieira M. B., Machado A. G., Renhe M. C., Giraldo G. A.: A particle-in-cell method for anisotropic fluid simulation. *Computers and Graphics*. 2022. Vol. 102. P. 220–232. doi: 10.1016/j.cag.2021.08.010
22. Liu G. R., Liu M. B.: Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method. New Jersey: World Scientific Publishing, 2003.
23. Liu M. B., Liu G. R.: Smoothed particle hydrodynamics (SPH): an overview and recent developments. *Arch. Comput. Method Eng.* 2010. Vol. 17. P. 25–76. doi: 10.1007/s11831-010-9040-7
24. Wang Z. B., Chen R., Wang H., Liao Q., Zhu X., Li S. Z. An overview of smoothed particle hydrodynamics for simulating multiphase flow. *Applied Math. Modelling*. 2016. Vol. 40(23-24). P. 9625–9655. doi: 10.1016/j.apm.2016.06.030
25. Koukouvinis P., Kyriazis N., Gavaises M. Smoothed particle hydrodynamics simulation of a laser pulse impact onto a liquid metal droplet. *PLoS ONE*. 2018. Vol. 13(9). e0204125. doi: 10.1371/journal.pone.0204125
26. Бритун В. Ф., Курдюмов А. В., Боримчук Н. И., Ярош В. В. Оценка Р,Т-условий, реализуемых при высокотемпературном ударном сжатии нитрида бора в цилиндрической ампуле сохранения. *Порошковая металлургия*. 2007. № 1. С. 3–10.
27. Ломоносов И. В., Фортгов В. Е., Фролова А. А., Хищенко К. В., Чарахчян А. А., Шуршалов Л. В. Численное исследование ударного сжатия графита и его превращения в алмаз в конических мишенях. *Журнал технической физики*. 2003. Т. 73:6. С. 66–75.
28. Бельхеева Р. К. Моделирование прямых и обратных фазовых переходов при ударно-волновом нагружении графита. *Сибирский журнал индустриальной математики*. 2007. Т. 10:1. С. 25–32.
29. Li S., Liu W. K.: A meshfree particle method. Berlin: Springer-Verlag, 2004.
30. Lions P.-L. Mathematical topics in fluid mechanics. Vol. 2. Oxford: Clarendon Press, 1998.

Надійшла: 07.06.2022 / Прийнята: 22.06.2022