

ISSN 0367-5203

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ И
ТЕХНИКИ

Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ

СЕРИЯ

**Математическое моделирование
физических процессов**

2012

ВЫПУСК 4

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 4

Издается с 1978 г.

Саров — 2012

Главный редактор Р. М. Шагалиев

Редакционная коллегия:

Ю. Г. Бартенев (ВНИИЭФ), Ю. А. Бондаренко (ВНИИЭФ) — зам. главного редактора,
А. Н. Быков (ВНИИЭФ), Н. Н. Залялов (ВНИИЭФ), А. Д. Зубов (ВНИИТФ),
Н. В. Иванов (ВНИИЭФ), В. Л. Ковалев (МГУ), М. Ю. Козманов (ВНИИТФ),
В. Е. Неуважаев (ВНИИТФ), Е. В. Соколовская (ВНИИЭФ) — ответственный секретарь,
А. А. Соловьев (ВНИИЭФ), В. Ф. Спиридонов (ВНИИЭФ),
В. Ф. Тишкин (ИММ РАН) — зам. главного редактора, А. А. Холостов (ВНИИЭФ),
А. Н. Чекалин (Казанский ГУ), В. Н. Чубариков (МГУ)

УДК 519.63

МЕТОД ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ ОПЕРАТОРА ШАГА УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

О. М. Козырев, В. П. Литвинов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Предлагается метод численного решения краевых задач уравнения теплопроводности. Метод основан на конструировании разностного оператора шага в виде операторного полинома. Конструирование операторного полинома происходит в пространстве фурье-образов с использованием многочленов Чебышева и Ланцоша. Алгоритм решения представляет собой явные пошаговые вычисления и реализован в виде схемы *предиктор-корректор*. Метод прост в реализации и поддается эффективному распараллеливанию. Изложение метода дается на примере решения задачи Коши для линейного уравнения теплопроводности. Представлены результаты численных решений известных тестовых задач.

Ключевые слова: уравнение теплопроводности, фурье-образ, полиномы Чебышева и Ланцоша.

Введение

Для численного решения уравнения теплопроводности с помощью сеточных методов используется, как правило, явная или неявная аппроксимация исходной дифференциальной задачи. Разностные методы, основанные на неявной аппроксимации, обладают высокой точностью и абсолютной устойчивостью вычислений. Такие методы, как правило, являются трудоемкими и не всегда поддаются эффективному распараллеливанию. Методы на основе явной аппроксимации лишены этих недостатков, они просты в реализации и позволяют проводить глубокое распараллеливание. Но использование явной схемы накладывает обременительное условие устойчивости [1], что увеличивает общий объем вычислительной работы.

Впервые вопрос о построении эффективных алгоритмов, обладающих меньшим объемом вычислений по сравнению с явной разностной схемой, исследован в работе [2]. Был предложен новый подход к построению итерационных процедур для решения уравнений параболического типа с заранее известным числом итераций, обеспечивающих устойчивость вычислений. В работах [3–7] предложена и практически опробована схема, реализуемая явными итерациями с чебышевским набором параметров. В этой схеме аппроксимация обеспечивается на первой итерации, а с помощью аналитических исследований находится необходимое количество итераций для обеспечения устойчивости вычислений.

В настоящей работе рассматривается численный метод решения краевых задач для нелинейного уравнения теплопроводности. Суть метода заключается в построении разностного оператора шага в виде операторного полинома на основе многочленов Чебышева и Ланцоша. Конструирование операторного полинома происходит в пространстве фурье-образов, где выполняется аппроксимация исходного дифференциального уравнения и аналитически вычисляется наименьший порядок полинома, необходимый для обеспечения устойчивости вычислений. Алгоритм расчета на каждом временном шаге представляет схему *предиктор-корректор*, реализуемую в виде рекуррентных соотношений, каждое из которых эквивалентно по трудоемкости явной разностной схеме. Поэтому метод

допускает высокую степень параллелизма и может быть эффективным при решении многомерных задач на многопроцессорных вычислительных системах.

Описание метода

Рассмотрим задачу Коши для линейного уравнения теплопроводности с одной пространственной переменной:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad x \in \mathbb{R}; \\ u(0, x) &= u^0(x). \end{aligned} \quad (1)$$

В случае явной аппроксимации исходному дифференциальному уравнению соответствует разностное уравнение вида

$$u^{n+1}(x) = u^n(x) + \tau Au^n(x),$$

записанное в операторном виде, где действие разностного оператора A на функцию $u(x)$ определяется как

$$Au(x) = h^{-2} \left(u(x+h) - 2u(x) + u(x-h) \right).$$

Неявная аппроксимация уравнения (1) приводит к уравнению вида

$$u^{n+1}(x) - \tau Au^{n+1}(x) = u^n(x).$$

Естественным обобщением рассмотренных уравнений является двухслойная разностная схема

$$u^{n+1}(x) = Gu^n(x), \quad (2)$$

где G — разностный оператор шага.

Будем конструировать оператор шага G в виде операторного полинома в пространстве фурье-образов с помощью многочленов Чебышева и Ланцоша. Применяя в пространстве L_2 к разностной схеме (2) преобразование Фурье [8], рассмотрим исходную задачу в пространстве фурье-образов функций L_2^* :

$$v^{n+1}(\omega) = P_s(\lambda) v^n(\omega).$$

Здесь $v(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} u(x) dx$ — фурье-образ [9] функции $u(x)$, а $P_s(\lambda)$ — некоторый искомый полином, соответствующий разностному оператору шага G . Через $\lambda(\omega)$ обозначен спектральный образ (фурье-образ) разностного оператора $-\tau A$, который равен $\lambda(\omega) = 2r - re^{i\omega h} - re^{-i\omega h} = 4r \sin^2 \alpha$, $0 \leq \lambda \leq 4r$, $0 \leq \alpha \leq \pi/2$, $\alpha = h\omega/2$, где $r = \tau h^{-2}$ — число Куранта для теплопроводности.

Для выполнения условия аппроксимации выберем искомый полином таким образом, чтобы первые два младших члена $P_s(\lambda)$ были равны 1 и $-\lambda$, что соответствует разностному оператору шага, младшие слагаемые которого будут равны E (единичный оператор) и τA . Это обеспечивает для выбранного оператора $-\tau A$ аппроксимацию исходного уравнения (1) с первым порядком по времени и вторым по пространству. Условие аппроксимации запишем в виде

$$\begin{cases} P_s(0) = 1; \\ \left. \frac{dP_s(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = -1. \end{cases} \quad (3)$$

Для обеспечения устойчивости разностной схемы в пространстве L_2 необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$\max_{0 \leq \lambda \leq 4r} |P_s(\lambda)| \leq 1. \quad (4)$$

Конструирование разностной схемы на основе полинома Чебышева

Первый способ построения искомого полинома $P_s(\lambda)$ основан на использовании многочлена Чебышева [10]

$$T_s(\xi) = \cos(s \arccos \xi), \quad -1 \leq \xi \leq 1.$$

Будем пользоваться следующими свойствами полинома:

$$\begin{aligned} |T_s(1)| &= 1, & \frac{dT_s(1)}{d\xi} &= s^2, & \forall s; \\ |T_s(\xi)| &\leq 1, & \forall \xi \in [-1, 1], & \forall s; \\ T_{s+1}(\xi) &= 2\xi T_s(\xi) - T_{s-1}(\xi), & \forall s. \end{aligned} \quad (5)$$

Рассмотрим линейное отображение $\lambda = s^2(1 - \xi)$. В качестве полинома $P_s(\lambda)$ возьмем многочлен Чебышева, в котором сделана линейная замена аргумента:

$$P_s(\lambda) = T_s\left(1 - \frac{\lambda}{s^2}\right) = \tilde{T}_s(\lambda).$$

Тогда для любого порядка полинома выполняются условия аппроксимации

$$P_s(0) = T_s(1) = 1; \quad \frac{d}{d\lambda}P_s(0) = \frac{d}{d\xi}T_s(1) \frac{d\xi}{d\lambda} = s^2 \left(-\frac{1}{s^2}\right) = -1.$$

Для обеспечения устойчивости (4), учитывая свойство (5), при линейном отображении $\xi \in [-1, 1]$ на $\lambda \in [0, 4r]$ необходимо задать условие $\xi(\lambda = 4r) \geq -1$, что выполняется только, когда порядок полинома $s \geq \sqrt{2r}$.

Для реализации схемы *предиктор-корректор* запишем полином в виде

$$P_s(\lambda) = 1 - \lambda \tilde{L}_{s-1}(\lambda),$$

где $\tilde{L}_{s-1}(\lambda) = \left(1 - \tilde{T}_s(\lambda)\right)/\lambda$ получается преобразованием многочлена Ланцоша, который будет рассмотрен далее. Для построения многочлена \tilde{L}_{s-1} воспользуемся рекуррентными соотношениями для полинома Ланцоша, которые можно получить из рекуррентных соотношений для полинома Чебышева:

$$\begin{aligned} \tilde{L}_0(\lambda) &= 1; & \tilde{L}_1(\lambda) &= 1 - \frac{\lambda}{2s^2}; \\ \tilde{L}_{\nu+1}(\lambda) &= 2 \left(\frac{\nu+1}{\nu+2}\right)^2 \left(1 - \frac{\lambda}{s^2}\right) \tilde{L}_\nu - \left(\frac{\nu}{\nu+2}\right)^2 \tilde{L}_{\nu-1} + \frac{2}{(\nu+2)^2}, & \nu &= \overline{1, s-2}, \quad s \geq \sqrt{2r}. \end{aligned}$$

Тогда в пространстве сеточных функций можно записать схему типа *предиктор-корректор*, где количество пошаговых вычислений для обеспечения устойчивости определяется условием $s \geq \sqrt{2r}$:

– предиктор

$$\begin{aligned} u_m^{(n,0)} &= u_m^n; & u_m^{(n,1)} &= \left(E + \frac{\tau A}{2s^2}\right) u_m^{(n,0)}; \\ u_m^{(n,\nu+1)} &= 2 \left(\frac{\nu+1}{\nu+2}\right)^2 \left(E + \frac{\tau A}{s^2}\right) u_m^{(n,\nu)} - \left(\frac{\nu}{\nu+2}\right)^2 u_m^{(n,\nu-1)} + \frac{2}{(\nu+2)^2} u_m^{(n,0)}; \\ \nu &= \overline{1, s-2}; \end{aligned}$$

– корректор

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \tau A u_m^{(n,s-1)}.$$

Нетрудно заметить, что реализация схемы на каждом временном шаге сопоставима с вычислениями по явной схеме, но общий объем вычислений при этом пропорционален корню из числа Куранта.

Конструирование разностной схемы на основе полинома Ланцоша

Второй способ построения $P_s(\lambda)$ аналогичен рассмотренному в предыдущем разделе способу и основан на использовании многочлена Ланцоша [11]

$$L_s(\xi) = \frac{1 - T_{s+1}(\xi)}{(s+1)^2(1-\xi)}, \quad \xi \in [-1, 1].$$

Здесь $T_{s+1}(\xi)$ — многочлен Чебышева $(s+1)$ -го порядка. На рис. 1 для наглядности изображены полиномы Ланцоша первых четырех порядков.

Возьмем в качестве $P_s(\lambda)$ многочлен следующего вида:

$$P_s(\lambda) = L_s \left[1 - \frac{6\lambda}{s(s+2)} \right] = \tilde{L}_s(\lambda).$$

Тогда для любого порядка s условия (3) выполняются равенства

$$\begin{aligned} P_s(0) &= L_s(1) = 1; \\ \frac{d}{d\lambda} P_s(0) &= \frac{d}{d\xi} L_s(1) \frac{d\xi}{d\lambda} = \frac{s(s+2)}{6} \left[-\frac{6}{s(s+2)} \right] = -1. \end{aligned}$$

Для обеспечения устойчивости в силу линейности $\lambda = \frac{s(s+2)}{6}(1-\xi)$ необходимо, чтобы

$$\xi(\lambda = 4r) \geq -1. \tag{6}$$

Условие (6) выполняется только, когда порядок полинома $s \geq \sqrt{12r+1} - 1$.

Для реализации схемы *предиктор-корректор* запишем

$$P_s(\lambda) = 1 - \lambda \tilde{R}_{s-1}(\lambda), \quad \text{где } \tilde{R}_{s-1}(\lambda) = \frac{1 - \tilde{L}_s(\lambda)}{\lambda}.$$

Чтобы найти полином \tilde{R}_{s-1} , необходимо воспользоваться рекуррентными формулами, которые получаются из соотношений для многочлена Ланцоша:

$$\begin{aligned} \tilde{R}_0(\lambda) &= 1; \quad \tilde{R}_1(\lambda) = 1 - \frac{2\lambda}{s(s+2)}; \\ \tilde{R}_{\nu+1}(\lambda) &= 2 \frac{(\nu+1)(\nu+2)}{(\nu+3)(\nu+4)} \left[1 - \frac{6\lambda}{s(s+2)} \right] \tilde{R}_\nu - \frac{\nu(\nu+1)^2}{(\nu+3)^2(\nu+4)} \tilde{R}_{\nu-1} + \frac{12(\nu+2)}{(\nu+3)^2(\nu+4)}. \end{aligned}$$

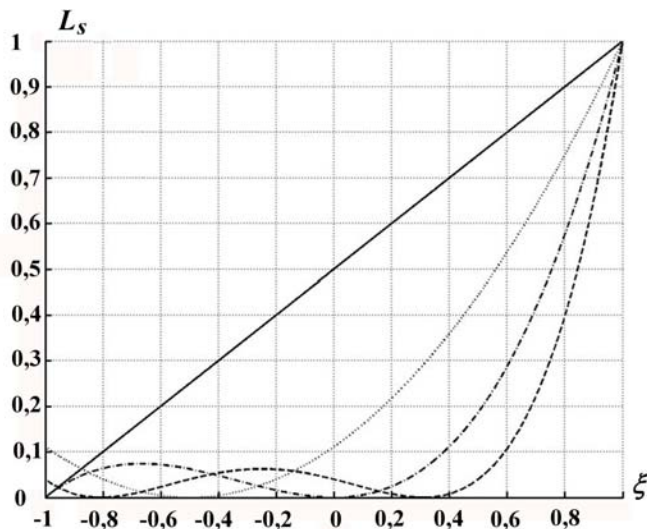


Рис. 1. Полиномы Ланцоша первых четырех порядков: — — $s = 1$; — $s = 2$; ····· — $s = 3$; - - - - - $s = 4$

Тогда в пространстве сеточных функций получим разностную схему следующего вида:

– предиктор

$$u_m^{(n,0)} = u_m^n; \quad u_m^{(n,1)} = \left[E + \frac{2}{s(s+2)} \tau A \right] u_m^{(n,0)};$$

$$u_m^{(n,\nu+1)} = 2 \frac{(\nu+1)(\nu+2)}{(\nu+3)(\nu+4)} \left[E + \frac{6}{s(s+2)} \tau A \right] u_m^{(n,\nu)} -$$

$$- \frac{\nu(\nu+1)^2}{(\nu+3)^2(\nu+4)} u_m^{(n,\nu-1)} + \frac{12(\nu+2)}{(\nu+3)^2(\nu+4)} u_m^{(n,0)}, \quad \nu = \overline{1, s-2};$$

– корректор

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \tau A u_m^{(n,s-1)}.$$

Спектральный анализ рассмотренных схем

Проанализируем поведение функций, соответствующих в пространстве образов Фурье разностным операторам шага для рассмотренных выше схем, и сравним с функциями для операторов шага дифференциального уравнения и неявной разностной схемы.

Сначала рассмотрим решение задачи Коши (1) на всей бесконечной прямой, которое можно представить в виде

$$u(t + \tau, x) = F(t + \tau, x) u^0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(t + \tau, x - y) u^0(y) dy,$$

где

$$F(t + \tau, x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi(t + \tau)}} \exp\left(-\frac{x^2}{4(t + \tau)}\right).$$

Функции $F(t + \tau, x)$ в пространстве L_2^* соответствует фурье-образ $\rho(\alpha) = \exp(-4r\alpha^2)$. Оператору шага неявной разностной схемы соответствует образ $\rho_n(\alpha) = (1 + \lambda(\alpha))^{-1}$, $\lambda(\alpha) = 4r \sin^2(\alpha)$.

Для схем на основе полиномов Чебышева и Ланцоша имеем

$$\rho_{\text{ч}}(\alpha) = \cos\left(m \arccos\left(\frac{1 - \lambda(\alpha)}{m^2}\right)\right);$$

$$\rho_{\text{л}}(\alpha) = \frac{1 - \cos\left((p+1) \arccos(1 - \xi(\alpha))\right)}{(p+1)^2 \xi(\alpha)}, \quad \xi(\alpha) = \frac{6\lambda(\alpha)}{p(p+2)},$$

где $m = \sqrt{2r}$; $p = \sqrt{12r+1} - 1$.

На рис. 2 графически изображены фурье-образы операторов шага дифференциального уравнения, неявной схемы, а также схем на основе полиномов Чебышева и Ланцоша для числа Куранта $r = 5,0$. На рис. 3 функции представлены в окрестности нуля.

Вычислительный алгоритм на основе полинома Чебышева экономнее алгоритма на основе полинома Ланцоша. Однако спектральный образ $\rho_{\text{ч}}(\alpha)$ качественно не воспроизводит образ оператора исходного дифференциального уравнения, являющийся положительной и монотонно убывающей функцией. С точки зрения соответствия спектру дифференциальной задачи предпочтительней схема на основе полинома Ланцоша. Во-первых, его спектральный образ положителен, а последовательность максимумов функции убывает с ростом частоты. Во-вторых, на начальном участке спектра образ $\rho_{\text{л}}(\alpha)$ ближе к спектральному образу исходного дифференциального уравнения (см. рис. 3).

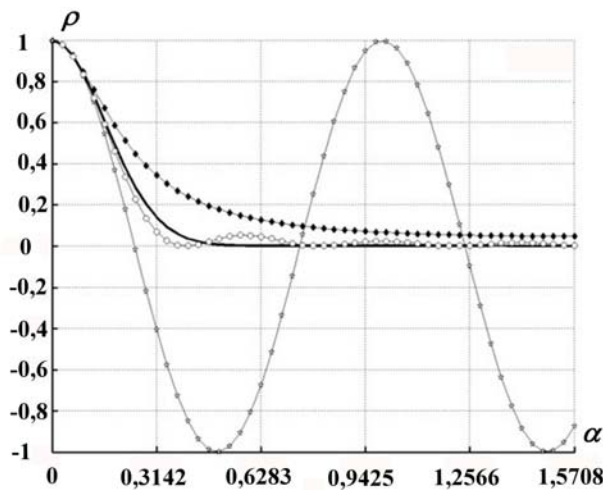


Рис. 2. Фурье-образы операторов шага: — — дифференциального уравнения; —◆— — неявной схемы; —★— — схемы на основе полинома Чебышева; —○— — схемы на основе полинома Ланцоша

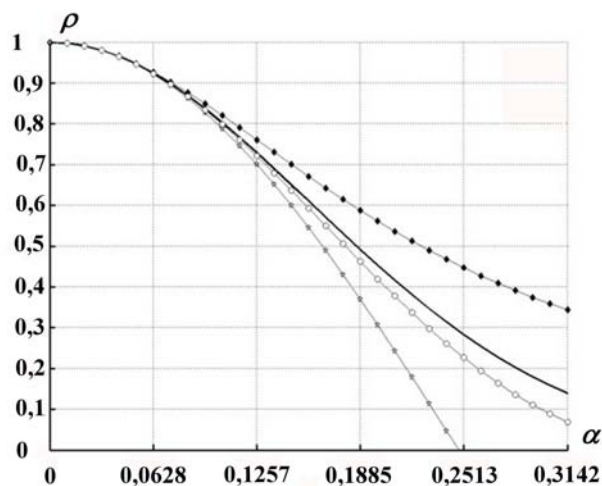


Рис. 3. Фурье-образы операторов шага в окрестности нуля: — — дифференциального уравнения; —◆— — неявной схемы; —★— — схемы на основе полинома Чебышева; —○— — схемы на основе полинома Ланцоша

Сравнение с явной разностной схемой

Чтобы наглядно показать отличие предлагаемых разностных схем от явной схемы, проведем оценку общего объема вычислительной работы.

Для полиномиальных схем переход на новый временной слой осуществляется с помощью операторного многочлена, содержащего s элементарных шагов. Каждый такой шаг эквивалентен по трудоемкости вычислений временному шагу явной разностной схемы. Тогда общее минимальное количество таких шагов при $t = 1$ составит

$$n_{\text{ч}} = \frac{\sqrt{2r}}{rh^2}; \quad n_{\text{л}} = \frac{\sqrt{12r+1}-1}{rh^2},$$

где $n_{\text{ч}}$, $n_{\text{л}}$ — общее количество шагов для схем на основе полиномов Чебышева и Ланцоша. Для явной разностной схемы согласно условию устойчивости [1] минимальное количество шагов можно вычислить как

$$n_{\text{я}} = \frac{2}{h^2}.$$

Таким образом, можно записать оценку, показывающую во сколько раз объем вычислений по явной схеме больше объема вычислений для полиномиальных схем (рис. 4):

$$\frac{n_{\text{я}}}{n_{\text{ч}}} = \frac{2r}{\sqrt{2r}}; \quad \frac{n_{\text{я}}}{n_{\text{л}}} = \frac{2r}{\sqrt{12r+1}-1}.$$

Из рис. 4 видно, что выигрыш в объеме вычислений по предложенным схемам тем больше, чем больше число Куранта.

Примеры расчетов тестовых задач

Далее рассмотрим результаты решения некоторых тестовых задач с граничными условиями второго рода. Для этого оператор A аппроксимировался специальным образом:

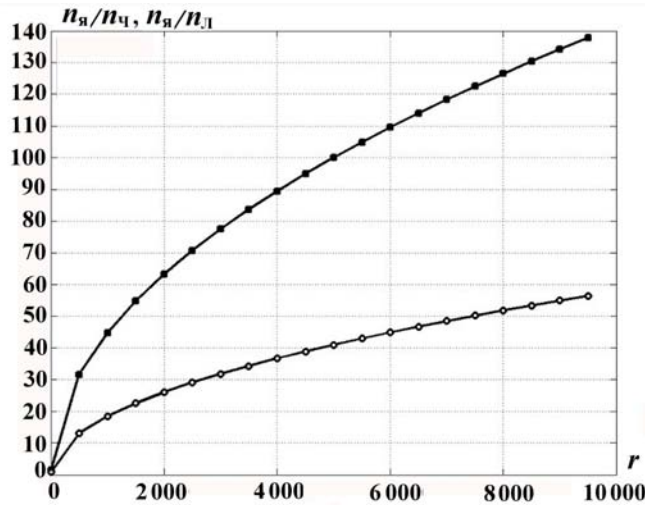


Рис. 4. Зависимости количества шагов от числа Куранта: —■— — $n_{я}/n_{ч}$; —○— — $n_{я}/n_{л}$

$$(Au)_m = \begin{cases} \frac{u_2}{h^2} - \frac{u_1}{h^2} + \frac{S_0}{h}, & m = 1; \\ \frac{u_{m+1}}{h^2} - 2\frac{u_m}{h^2} + \frac{u_{m-1}}{h^2}, & m = \overline{2, M-1}; \\ \frac{S_1}{h} - \frac{u_M}{h^2} + \frac{u_{M-1}}{h^2}, & m = M, \end{cases}$$

где S_0, S_1 — нормальные составляющие потока тепла на границе.

Задача 1. Решение линейного уравнения теплопроводности. На отрезке $0 \leq x \leq 1$ рассматривается решение уравнения (1) в виде

$$u(x, t) = 1 - \sin(\pi x) e^{-\pi^2 t}. \quad (7)$$

Начальные и краевые условия определяются из решения (7).

Целью теста является оценка точности численных решений линейного уравнения теплопроводности в сравнении с точным решением задачи.

На рис. 5 графически изображено точное решение и численные решения по схемам на основе полиномов Чебышева и Ланцоша. Приближенные решения получены на равномерной разностной сетке с шагом по пространству $h = 0,02$, при числе Куранта $r = 2,5$. Видно, что профили численных решений для рассматриваемых схем согласуются с точным решением задачи.

Задача 2. О распространении тепла от плоского мгновенного источника [12]. В начальный момент времени в плоскости $x = 0$ выделяется конечное количество энергии E . В последующее время тепло растекается от плоскости $x = 0$ в обе стороны. Так как приток энергии в систему отсутствует, распределение температуры в пространстве должно подчиняться условию сохранения энергии $\int_{-\infty}^{\infty} u dx = E$.

Решение задачи имеет вид

$$u(x, t) = \frac{E}{\sqrt{4\pi t}} e^{-x^2/4t}.$$

Целью расчета данной задачи является проверка монотонности получаемого численного решения при наличии разрыва в начальных условиях.

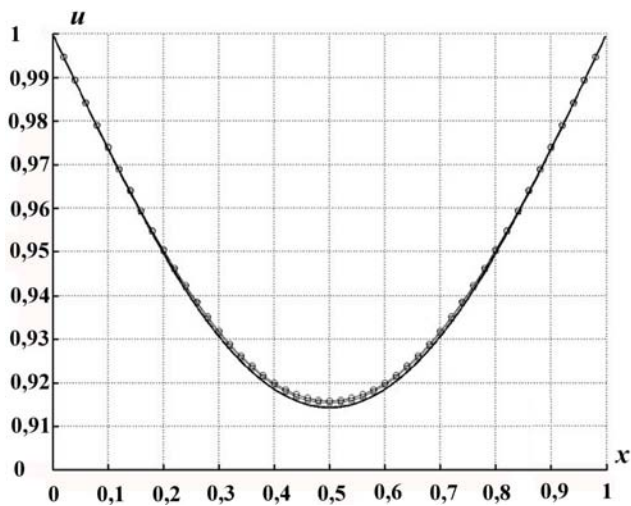


Рис. 5. Профили температур в задаче 1: — — точное решение; —○— — по схеме на основе полинома Чебышева; —□— — по схеме на основе полинома Ланцоша

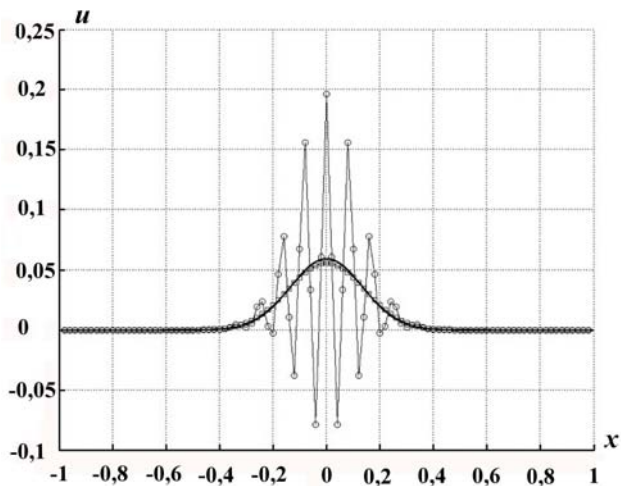


Рис. 6. Профили температур в задаче 2: — — точное решение; —○— — по схеме на основе полинома Чебышева; —□— — по схеме на основе полинома Ланцоша

На рис. 6 представлены результаты решения задачи по схемам на основе полиномов Чебышева и Ланцоша в сравнении с точным решением при числе Куранта $r = 2,5$. Видно, что точное решение имеет немонотонный профиль, а решение по схеме на основе полинома Ланцоша монотонно и в пределах точности чертежа хорошо согласуется с точным решением задачи.

Задача 3. О бегущей тепловой волне. Рассмотрим задачу о распространении тепловой волны [13] в области $0 \leq x \leq 1$ для нелинейного уравнения с коэффициентом теплопроводности $\chi(u) = u^3$. Начальные и краевые условия второго рода определяются из аналитического решения

$$u(x, t) = \begin{cases} \sqrt[3]{15(t-x)}, & x \leq 5t; \\ 0, & x > 5t. \end{cases}$$

Область решения $x \in [0, 1]$ разбивалась равномерно на 50 интервалов, максимальное число Куранта $\max_{0 \leq x \leq 1} (r) = 17,9$. Тепловая волна за один шаг по времени распространялась на $d\tau/h = 0,25$ интервала по пространству.

Как видно из рис. 7, численное решение, полученное по схеме на основе полинома Чебышева без итерирования коэффициента χ , является немонотонным. Коэффициент теплопроводности вычислялся по формуле

$$\chi_m^{n+1} = 0,5 \left((u_m^n)^3 + (u_{m+1}^n)^3 \right), \quad m = 1, 2, \dots, M-1.$$

Для решения по схеме на основе полинома Чебышева с итерированием коэффициента теплопроводности использовался следующий критерий выхода из итераций:

$$\max_{0 \leq x \leq 1} \left| \frac{u_m^{\mu+1} - u_m^\mu}{u_m^\mu} \right| \leq \varepsilon,$$

где μ — номер итерации; ε принималось равным 10^{-3} ; при этом среднее значение итераций на шаге было равно 8.

На рис. 7 также показан профиль температуры, полученный при решении задачи по схеме на основе полинома Ланцоша без итерирования коэффициента теплопроводности. Можно отметить,

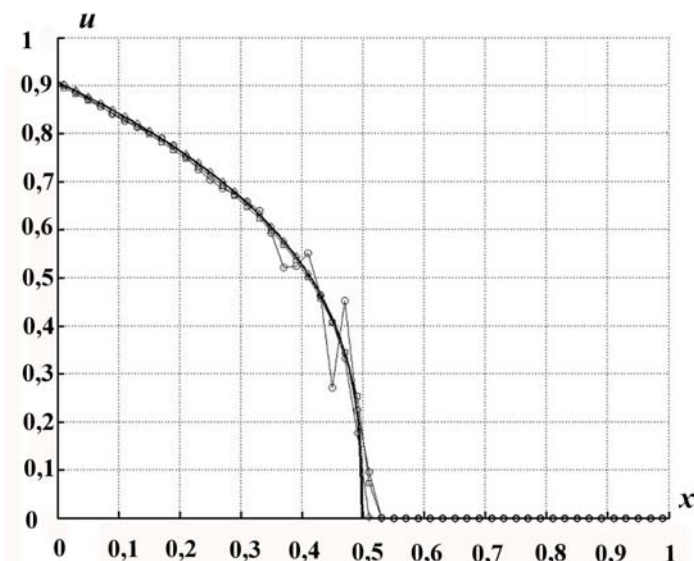


Рис. 7. Профили температур в задаче 3: — — точное решение; —○— — по схеме на основе полинома Чебышева без итерирования χ ; —□— — по схеме на основе полинома Чебышева с итерированием χ ; —◇— — по схеме на основе полинома Ланцоша без итерирования χ

что профиль решения монотонный и хорошо описывает точное решение, а вычислительные затраты сопоставимы с решением по схеме на основе полинома Чебышева с итерированием коэффициента теплопроводности.

Заключение

Отличительной особенностью метода является конструирование оператора шага в виде операторного полинома. Метод не ограничен использованием лишь представленных конструкций операторов шага (на основе полиномов Чебышева и Ланцоша), а имеет очевидные обобщения.

Результаты проведенных тестовых расчетов показывают высокую точность метода, а также его применимость для решения задач в широком диапазоне чисел Куранта.

Объем вычислений предлагаемого метода пропорционален квадратному корню из числа Куранта, что при больших значениях чисел Куранта на порядки сокращает объем вычислений по сравнению с явной схемой.

Алгоритм метода представляет собой пошаговые явные вычисления, поэтому может быть эффективен при решении многомерных задач с использованием параллельных вычислений.

Список литературы

1. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973.
2. Чжао-Дин Юань. Некоторые разностные схемы решения первой краевой задачи для линейных дифференциальных уравнений с частными производными: Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. М.: МГУ, 1958.
3. Локуцкий В. О., Локуцкий О. В. Применение чебышевских параметров для численного решения некоторых эволюционных задач: Препринт № 99. М.: ИПМ АН СССР, 1984.
4. Локуцкий В. О., Локуцкий О. В. Об одном методе численного решения краевых задач для некоторых эволюционных уравнений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1986. Вып. 2. С. 90—94.

5. Жуков В. Т. Численные эксперименты по решению уравнения теплопроводности методом локальных итераций: Препринт № 97. М.: ИПМ АН СССР, 1984.
6. Жуков В. Т. Разностные схемы локальных итераций для параболических уравнений: Препринт № 173. М.: ИПМ АН СССР, 1986.
7. Жуков В. Т. Явно итерационные разностные схемы для параболических уравнений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 4. С. 40—46.
8. Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Физматлит, 2004.
9. Жуков А. И. Метод Фурье в вычислительной математике. М.: Наука, 1992.
10. Гончаров В. Л. Теория интерполирования и приближения функций. М.: ГТТИ, 1934.
11. Фадеев Д. К., Фадеев В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.: Изд.-во физ.-мат. лит., 1963.
12. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
13. Самарский А. А., Соболев И. М. Примеры численного расчета температурных волн // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1963. Т. 3, № 4. С. 702—719.

Статья поступила в редакцию 06.03.12.

УДК 519.6

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ РАЗВИТИЯ ПОВРЕЖДЕННОСТИ В ТВЕРДЫХ МАТЕРИАЛАХ ПРИ ИМПУЛЬСНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

С. С. Соколов
РФЯЦ-ВНИИЭФ

Представлена феноменологическая модель кинетики зарождения, развития и уменьшения поврежденности в твердых материалах под действием импульсных нагрузок и компактирования разрушенных материалов под действием сил сжатия. При построении модели был использован континуально-кинетический подход, в рамках которого разрушение моделируется как процесс накопления повреждений под действием растягивающих напряжений и из-за сдвиговых деформаций. Приводятся результаты численного моделирования разрушения клиновидных урановых образцов и плоского алюминиевого образца и дается их сравнение с экспериментальными данными.

Ключевые слова: феноменологическая модель, зарождение и развитие поврежденности, разрушение из-за сдвиговых деформаций и растягивающих напряжений, компактирование, валидационные расчеты.

Введение

При использовании конструкций, подвергающихся в процессе их эксплуатации воздействию интенсивных импульсных нагрузок, актуальными являются вопросы повреждения материалов и их разрушения. При динамическом деформировании упругопластических материалов может образовываться большое число микродефектов различного типа. Численное описание каждого микродефекта отдельно при рассмотрении импульсных воздействий на реальные полномасштабные конструкции является достаточно сложной задачей. Сложность задачи заключается в том, что процессы разрушения развиваются на микро-, мезо- и макроуровнях и сопровождаются, как правило, развитыми пластическими деформациями [1]. Поэтому рассмотрение вопросов, связанных с развитием поврежденности материалов и их разрушением в условиях импульсного воздействия на реальные конструкции, наиболее часто проводится в рамках механики континуального разрушения.

В настоящее время для условий ударно-волновых воздействий нет строго завершенной теории о развитии процессов разрушения материалов, хотя данным вопросам посвящено много работ теоретического и экспериментального характера. На их основе происходят разработки новых и развитие уже существующих феноменологических моделей для моделирования процессов динамики разрушения (описанных, например, в работах [1–13]), среди которых наиболее широкое распространение получили два типа моделей, основанные на кинетическом и энергетическом подходах.

В условиях ударно-волновых и импульсных воздействий более привлекательными являются модели, основанные на кинетическом подходе, которые позволяют отслеживать в динамике процессы зарождения и развития поврежденности в материалах. В данной работе рассматривается одна из таких моделей. В рамках рассматриваемой феноменологической модели учитываются кинетика образования, развития и слияния пор под действием растягивающих напряжений и поврежденность материала из-за сдвиговых пластических деформаций, а также уменьшение поврежденности под действием сжимающих напряжений. В ней также полагается, что рост и взаимодействие различных микроповрежденностей материала, в конечном итоге, могут приводить к макроразрушению твердого материала в локальной области.

Рассматриваемый кинетический подход позволяет моделировать как развитие, так и уменьшение поврежденности материала, количественными характеристиками которых служат мера поврежденности материала под действием сжимающих и растягивающих напряжений и мера поврежденности из-за сдвиговых деформаций. Уравнения, определяющие напряженно-деформированное состояние материала, учитывают как релаксацию напряжений за счет образования микропор и поврежденности материала из-за сдвиговых деформаций, так и восстановление прочностных свойств материала за счет уменьшения меры поврежденности материала под действием сжимающих напряжений.

Модель реализована в рамках методики ТИМ [14–15], предназначенной для расчета нестационарных задач механики сплошной среды на неструктурированных лагранжевых сетках произвольной структуры.

Сложность построения моделей разрушения для описания поведения реальных конструкций в условиях импульсных воздействий связана с тем, что почти в каждой металлической детали есть зародышевые дефекты: вакансии, дислокации, микротрещины, неметаллические включения, усадочные раковины, закалочные трещины и т. д. Также при изготовлении деталей в теле могут появиться и технологические дефекты, связанные, например, с механической обработкой его поверхности. Максимальные напряжения вблизи таких опасных дефектов под действием даже относительно небольших нагрузок могут превышать предел текучести. В этих зонах под действием переменных нагрузок может происходить накопление пластических деформаций, которые с течением времени приводят к исчерпанию запаса пластичности, росту трещин и разрушению материала. При детальном учете рассмотренных выше особенностей процессов разрушения модель была бы достаточно громоздка и требовала бы большого количества параметров. Поэтому в рассматриваемом варианте феноменологической модели кинетики поврежденности и разрушения были учтены наиболее значимые характеристики напряженно-деформируемого состояния, влияющие на основные этапы развития разрушения металлов, — это растягивающие напряжения и сдвиговые деформации. Для определения меры поврежденности материала под действием растягивающих напряжений можно выделить несколько основных стадий: зарождение поврежденности в виде микропустот; рост микропустот под действием растягивающего давления в окружающем их сплошном материале (матрице); слияние микропустот, которое приводит к локальному разрушению материала. Под действием сжимающих напряжений может происходить процесс уменьшения поврежденности материала. Для описания указанных процессов, по аналогии с работами [3, 9], вводится в рассмотрение скалярная функция ω — мера поврежденности материала за счет образовавшихся в нем пустот для удельного объема:

$$\omega = \frac{V_p}{V} = \frac{V_p}{V_p + V_s} = 1 - \frac{\rho}{\rho_s}, \quad (1)$$

где $V = 1/\rho$ — текущий удельный объем поврежденного материала; V_p и V_s — текущие удельные объемы микропустот (пор) и сплошного материала; ρ — текущая средняя плотность поврежденного материала; ρ_s — текущая плотность сплошного материала.

Для определения меры поврежденности материала из-за сдвиговых деформаций можно также выделить основные стадии: зарождение поврежденности в виде микротрещин и развитие микротрещин, которое приводит к локальному разрушению материала. Под действием сжимающих напряжений может происходить процесс уменьшения (закрытия) поврежденности материала в виде микротрещин. Для описания данных процессов вводится в рассмотрение скалярная функция β — мера поврежденности материала за счет образовавшихся в нем микротрещин для удельного объема.

Возникновение в материале микроповрежденностей приводит к релаксации напряжений, изменению реологических свойств материала, перераспределению напряжений в зависимости от меры поврежденности в локальных областях материала. Развитие процессов кинетики поврежденности и разрушения материалов влияет на газодинамические ударно-волновые процессы. Уравнение состояния (УРС) для поврежденного материала, содержащего пустоты, возьмем в следующем виде [3, 9]:

$$P(\rho, E, \omega) = (1 - \omega) P_s(\rho_s, E) = (1 - \omega) P\left(\frac{\rho}{1 - \omega}, E\right), \quad (2)$$

где $P_s(\rho_s, E_s) = P_s\left(\frac{\rho}{1-\omega}, E\right)$ — УРС сплошного вещества; ω — мера поврежденности материала в виде пустот; $\rho_s = \frac{\rho}{1-\omega}$ — плотность матрицы сплошного вещества; ρ — средняя плотность материала с учетом его поврежденности; $E = E_s$ — удельная внутренняя энергия материала.

В общем виде уравнения для зарождения, развития и уменьшения поврежденности твердых материалов под действием растягивающих напряжений и из-за сдвиговых деформаций в рассматриваемой модели представим следующим образом:

$$\frac{d\omega}{dt} = (\omega_{кр} - \omega) g_1(P_s, S_{ij}, T, \dot{\epsilon}, \beta) + \omega g_2(P_s, S_{ij}, T) - \omega g_3(P_s, S_{ij}, T); \quad (3)$$

$$\frac{d\beta}{dt} = \frac{\beta^\alpha}{1-\beta} g_4(P_s, S_{ij}, T, \dot{\epsilon}_{сдв}, \epsilon_{сдв}, \omega) + \beta g_5(P_s, S_{ij}, T, \dot{\epsilon}_{сдв}, \omega) + \beta g_6(P_s, S_{ij}, T, \dot{\epsilon}_{сдв}, \epsilon_{сдв}, \omega), \quad (4)$$

где $P_s, S_{ij}, T, \dot{\epsilon}, \dot{\epsilon}_{сдв}, \epsilon_{сдв}$ — соответственно давление в матрице сплошного материала, девиатор тензора напряжений, температура, скорость деформаций, скорость и интенсивность сдвиговых пластических деформаций; ω и β — меры поврежденности за счет образования сферических пор и за счет образования микротрещин; α — показатель нелинейности; t — время; $g_1, g_2, g_3, g_4, g_5, g_6$ — функциональные зависимости для развития разных стадий поврежденности.

Зарождение и развитие поврежденности материала под действием растягивающих напряжений

Предполагается, что зарождение и развитие поврежденности материала под действием растягивающих напряжений происходит в виде дефектов (пор), имеющих сферическую форму. При их расчете учитываются упруговязкопластические свойства материалов, выраженные через второй инвариант девиатора тензора напряжений. Это позволяет в локальных зонах поврежденности считать материал изотропным. Учет тепловых поправок в модели связан с тем, что прочностные свойства материалов меняются с изменением температуры. Для этого используются температурные поправки на пороговые значения напряжений, нормированные на температуры плавления и кипения материала.

Зарождение поврежденности материала под действием растягивающих напряжений описывается следующей зависимостью для функции $g_1(P_s, S_{ij}, T, \dot{\epsilon}, \beta)$ в уравнении (3):

$$g_1(P_s, S_{ij}, T, \dot{\epsilon}, \beta) = \frac{-P_s - f_1(T) P_h + \frac{2}{3}(J_2(S_{ij}) - f_2(T) Y)}{f_1(T) P_1 + \frac{2}{3}(Y - J_2(S_{ij}))(1-\beta)} \times \\ \times \dot{\epsilon} H\left(-P_s - f_1(T) P_h + \frac{2}{3}(J_2(S_{ij}) - f_2(T) Y)\right), \quad (5)$$

где P_1 — нормированное давление (параметр среды); P_h — пороговое давление, выше которого в среде не происходит образования новых пор; $P_s = P(\rho_s, E)$ — давление при расширении матрицы сплошного материала ($P_s < 0$); $\rho_s = \frac{\rho}{1-\omega}$ — плотность матрицы сплошного вещества; H — единичная функция Хевисайда; Y — предел текучести при начальных условиях; ω — мера поврежденности материала в виде пор под действием растягивающих напряжений, β — мера поврежденности

материала из-за сдвиговых деформаций; $J_2(S_{ij}) = \frac{\sqrt{\frac{3}{2} S_{ij} S_{ij}}}{(1-\omega)(1-\beta)}$ — второй инвариант девиатора тензора напряжений для матрицы сплошного материала; $\dot{\epsilon} = \text{div}(\vec{U})$; $f_1(T), f_2(T)$ — температурные поправки. Здесь можно отметить, что скорость зарождения микроповрежденности в материале зависит как от напряжений, так и от скорости деформации и температуры материала при рассматриваемом напряженно-деформированном состоянии.

Развитие микроповрежденности при действии растягивающих напряжений описывается следующей зависимостью для функции $g_2(P_s, S_{ij}, T)$ в уравнении (3):

$$g_2(P_s, S_{ij}, T) = 3 \frac{-P_s - f_1(T) P_g + \frac{2}{3} (J_2(S_{ij}) - f_2(T) Y)}{f_1(T) 4\eta + \frac{2}{3} (Y - J_2(S_{ij})) \tau_0} \times \\ \times H \left(-P_s - f_1(T) P_g + \frac{2}{3} (J_2(S_{ij}) - f_2(T) Y) \right), \quad (6)$$

где P_g — пороговое давление, выше которого в среде не происходит роста пор; P_s — давление при расширении матрицы сплошного материала ($P_s < 0$); η — эффективная вязкость материала.

Для зарождения и развития поврежденности используются тепловые зависимости относительно предела текучести и пороговых значений давления:

$$f_1(T) = \frac{1 + \cos \left(\pi \left(\frac{T}{T_{\text{кип}}} \right)^l \right)}{1 + \cos \left(\pi \left(\frac{T_0}{T_{0\text{кип}}} \right)^l \right)}; \quad (7)$$

$$f_2(T) = \frac{1 + \cos \left(\pi \left(\frac{T}{T_{\text{пл}}} \right)^l \right)}{1 + \cos \left(\pi \left(\frac{T_0}{T_{0\text{пл}}} \right)^l \right)}; \quad (8)$$

где T , T_0 , $T_{\text{пл}}$, $T_{0\text{пл}}$, $T_{\text{кип}}$, $T_{0\text{кип}}$ — соответственно температура при текущем напряженно-деформированном состоянии, начальная температура (при нормальных условиях 293 К), температура плавления при текущем напряженно-деформированном состоянии, температура плавления при нормальных условиях, температура кипения при текущем напряженно-деформированном состоянии, температура кипения при нормальных условиях; l — параметр модели.

Из рассмотрения уравнений для расчета зарождения и развития поврежденности и УРСа поврежденной среды видно, что они зависят друг от друга. Численно данные уравнения можно решать итерационно относительно друг друга по времени. При этом необходимо осуществлять проверки на скорость роста поврежденности в материале за счетный шаг, исходя из условия, что при вычисленной новой поврежденности давление в материале не может стать положительным.

Разгрузка поврежденного материала происходит по адиабате Пуассона. При достижении отрицательного порогового давления P_{g0} начинается растяжение вещества с ростом ранее сформированных пор, а при достижении порогового давления P_{h0} начинается образование новых пор. Уравнения описывают два этапа накопления микроповреждений — их образование и рост при разгрузке, которые могут приводить к разрушению материала.

При достижении критической поврежденности $\omega_{\text{кр}}$ процесс переходит в следующую стадию — слияния микродефектов. Материал перестает сопротивляться расширению, т. е. происходит его разрушение. Предполагается, что в этом случае вещество распадается на невзаимодействующие между собой фрагменты, и напряжение в нем полагается равным нулю. Дальнейшее расширение разрушенного материала осуществляется по нулевой изобаре, что не приводит к изменению давления, которое остается нулевым. При этом мера поврежденности среды ω определяется по уравнению (2) из условия, что при данном состоянии среды (ρ , E) давление в материале должно быть равно нулю.

Здесь можно также отметить, что пластическое течение в материалах определяется деформациями сдвига и вызывается касательными напряжениями. Отрыв же одной части материала от другой совершается под действием нормальных напряжений. При развитии пластической деформации рост нормальных напряжений в материале замедляется, что затрудняет развитие поврежденности материала под действием растягивающих напряжений и разрушение отрывом. Сам же

характер развития поврежденности и разрушения тела при растягивающих напряжениях определяется соотношением действия нормальных и касательных напряжений, а также соотношением двух механических характеристик материала — сопротивления сдвигу и сопротивления отрыву. Сопротивление сдвигу связано с напряжением трения, способствующим движению дислокаций. При этом предел текучести уменьшается с повышением температуры. Сопротивление отрыву слабее зависит от температуры, но накопленные пластические деформации, упрочняя материал, приводят к незначительному повышению сопротивления отрыву.

Уменьшение поврежденности материала под действием сжимающих напряжений

Решение многих прикладных задач связано с многократным прохождением по элементам конструкций ударных волн и волн разрежения. Поэтому за волной разрежения через достаточно короткое время может прийти волна сжатия, которая приводит к повышению давления в материале. Под действием сжимающих напряжений может происходить частичное уменьшение меры поврежденности. Для описания этой стадии используется следующее выражение для функции $g_3(P_s, S_{ij}, T)$ из уравнения (3):

$$g_3(P_s, S_{ij}, T) = 3 \frac{P_s + \frac{2}{3} J_2(S_{ij}) - f_1(T) P_g - f_2(T) \frac{2}{3} Y}{f_1(T) 4\eta + \frac{2}{3} (Y - J_2(S_{ij})) \tau_0} \times \\ \times \frac{P_s + \frac{2}{3} J_2(S_{ij})}{f_1(T) P_{\text{ком}} + f_2(T) \frac{2}{3} Y} H \left(P_s - f_1(T) P_g + \frac{2}{3} (J_2(S_{ij}) - f_2(T) Y) \right), \quad (9)$$

где P_g — пороговое давление, ниже которого в среде не происходит сжатия пор; P_s — давление при сжатии матрицы сплошного материала ($P_s > 0$).

Видно, что уравнение уменьшения поврежденности (9) и УРС поврежденной среды (2) зависят друг от друга. Численно данные уравнения можно решать итерационно относительно друг друга по времени. При этом необходимо осуществлять проверки на скорость уменьшения меры поврежденности в материале, исходя из условия, что при вычисленной новой поврежденности давление в материале не может стать отрицательным.

Развитие поврежденности материала из-за сдвиговых деформаций

Поврежденность материала может происходить не только под действием растягивающих напряжений, но и из-за сдвиговых деформаций. Здесь предполагается, что такая поврежденность материала начинает развиваться, если величина необратимых пластических деформаций достигает некоторого предельного значения.

Зарождение поврежденности материала при сдвиговых пластических деформациях β описывается следующей зависимостью для функции $g_4(P_s, S_{ij}, T, \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}, \varepsilon_{\text{сдв}}, \omega)$ из уравнения (4):

$$g_4(P_s, S_{ij}, T, \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}, \varepsilon_{\text{сдв}}, \omega) = \left(\varepsilon_{\text{сдв}}(\bar{T}, t) - \varepsilon_0 \theta \right) \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}(\bar{T}, t) \times \\ \times \left(1 - \frac{P_s + \frac{2}{3} J_2(S_{ij})}{f_1(T) \tilde{P}_{\text{ком}} + \frac{2}{3} Y} \right) \frac{J_2(S_{ij})}{Y \left(1 - \frac{\omega}{\omega_{\text{кр}}} \right)} f_2(T) H \left(\varepsilon_{\text{сдв}}(\bar{T}, t) - \varepsilon_0 \theta \right), \quad (10)$$

где ε_0 , $\tilde{P}_{\text{ком}}$ — параметры модели для конкретного материала, соответствующие предельной сдвиговой пластической деформации и давлению компактирования для формируемых микротрещин; $\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}$ — компоненты девиатора тензора скоростей деформации в данный

момент времени; ρ, ρ_0 — текущая и начальная плотности материала; $\theta = (\rho/\rho_0)^3$; t — текущий момент времени; $T_0, T_{0\text{пл}}$ — температура материала и температура его плавления при начальных условиях; $\bar{T}_0 = T_0/T_{0\text{пл}}$; T — текущая температура; $T_{\text{пл}}$ — температура плавления в рассматриваемом напряженно-деформированном состоянии; $\bar{T} = T/T_{\text{пл}}$; ω — поврежденность материала под действием

$$\text{растягивающих напряжений; } \dot{\epsilon}_{ij}^p = \begin{cases} \frac{3s_{ij}}{2Y_S^2} \sum_{k,l} s_{kl} \dot{\epsilon}_{kl}, & \text{если } \sum_{k,l} s_{kl} \dot{\epsilon}_{kl} > 0 \text{ и } \sqrt{\frac{3}{2}s_{ij}s_{ij}} \geq Y_S; \\ 0, & \text{если } \sum_{k,l} s_{kl} \dot{\epsilon}_{kl} < 0 \text{ или } \sqrt{\frac{3}{2}s_{ij}s_{ij}} \leq Y_S \end{cases}$$

компоненты девиатора тензора скорости пластической деформации; $\dot{\epsilon}_p = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\epsilon}_{ij}^p \dot{\epsilon}_{ij}^p$ — интенсивность

скорости пластической деформации; $\dot{f}(T, t) = -\pi l T^{l-1} \dot{T} \frac{\sin(\pi T^l(t))}{1 + \cos(\pi \bar{T}_0^l)} H(\dot{T}) H(1 - T)$ — функция

тепловой наследственности; $\varepsilon_{\text{сдв}}(\bar{T}, t) = \int \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}(\bar{T}, t) dt$ — остаточные деформации с учетом тепловой наследственности; $\dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}(\bar{T}, t) = \dot{\epsilon}_p \frac{1 + \cos(\pi T^l)}{1 + \cos(\pi \bar{T}_0^l)} + \varepsilon_{\text{сдв}}(\bar{T}, t) \dot{f}(\bar{T}, t)$.

Развитие поврежденности материала из-за сдвиговых деформаций β описывается следующей зависимостью для функции $g_5(P_s, S_{ij}, T, \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}, \omega)$ из уравнения (4):

$$g_5(P_s, S_{ij}, T, \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}, \omega) = c_n \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}} \left(f_2(T) - \frac{P_s + \frac{2}{3} J_2(S_{ij})}{f_1(T) \tilde{P}_{\text{ком}} + \frac{2}{3} Y} \right) \times \\ \times \frac{J_2(S_{ij}) f_2(T)}{Y \left(1 - \frac{\omega}{\omega_{\text{кр}}} \right)} H \left(f_2(T) - \frac{P_s + \frac{2}{3} J_2(S_{ij})}{f_1(T) \tilde{P}_{\text{ком}} + \frac{2}{3} Y} \right), \quad (11)$$

где c_n — параметр модели для конкретного материала, соответствующий скорости изменения меры поврежденности из-за сдвиговых деформаций.

Уменьшение поврежденности материала из-за сдвиговых пластических деформаций β описывается следующей зависимостью для функции $g_6(P_s, S_{ij}, T, \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}, \varepsilon_{\text{сдв}}, \omega)$ из уравнения (4):

$$g_6(P_s, S_{ij}, T, \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}}, \varepsilon_{\text{сдв}}, \omega) = c_n \dot{\varepsilon}_{\text{сдв}} \varepsilon_{\text{сдв}} \left(f_2(T) - \frac{P_s + \frac{2}{3} J_2(S_{ij})}{f_1(T) \tilde{P}_{\text{ком}} + \frac{2}{3} Y} \right) \times \\ \times \frac{J_2(S_{ij})}{Y} H \left(\frac{P_s + \frac{2}{3} J_2(S_{ij})}{f_1(T) \tilde{P}_{\text{ком}} + \frac{2}{3} Y} - f_2(T) \right) H(\omega_{\text{кр}} - \omega). \quad (12)$$

Поврежденность материала из-за сдвиговых деформаций начинает формироваться в области пластических деформаций при достижении $\varepsilon_{\text{сдв}}$ предельного значения. После зарождения поврежденности этот процесс может развиваться и в области упругих деформаций. При достижении меры поврежденности материала из-за сдвиговых деформаций β значения 1 считается, что материал разрушен из-за пластических деформаций, порождаемых сдвиговыми напряжениями. Уменьшение меры поврежденности материала в виде микротрещин может происходить только в области пластических сдвиговых деформаций.

Расчет напряжений в поврежденном материале

Различие в формах микроповреждений приводит к разному усреднению напряжения в поврежденном материале и оказывает влияние на дальнейшее развитие процесса разрушения. В зависимости от используемого приближения механики сплошной среды (гидродинамики, упругопластичности, упруговязкопластичности) для определения тензора напряжений в поврежденной среде можно использовать разные дополнительные уравнения.

Рассмотрим общий случай — упруговязкопластическое приближение. Шаровая составляющая тензора обобщенного напряжения складывается из гидростатического давления, определяемого из УРСа с учетом поврежденности материала, и вязкого давления. Девиатор обобщенного напряжения включает в себя составляющие девиатора тензора упругопластических и вязких напряжений. Таким образом, имеем

$$P = P^r + P^b, \quad P^b = \frac{1}{3}\mu_1 S_P D; \quad S = S^{yp} + S^b, \quad S^b = \mu_2 \left(D - \frac{1}{3} S_P D \right),$$

где P^r — определяется из УРСа (3); S^{yp} — девиатор тензора упругопластических напряжений; P^b , S^b — давление и девиатор тензора вязких напряжений; μ_1, μ_2 — коэффициенты первой и второй динамической вязкости.

При сдвиговой поврежденности считается, что сами микротрещины в материале не занимают объема. При накоплении повреждений в материале под действием растягивающих напряжений и из-за сдвиговых деформаций происходит изменение упруговязкопластических свойств среды. Расчет характеристик поврежденной среды производится по следующим зависимостям:

– модуль сдвига

$$G = \frac{1}{2} G_s \left[1 + \cos \left(\pi \left(\omega' (\beta - 1) - \beta \right) \right) \right]; \quad (13)$$

– первая динамическая вязкость

$$\mu_1 = \frac{1}{2} \mu_{0,1} \left(1 + \cos (\pi \omega) \right); \quad (14)$$

– вторая динамическая вязкость

$$\mu_2 = \frac{1}{2} \mu_{0,2} \left[1 + \cos \left(\pi \left(\omega' (\beta - 1) - \beta \right) \right) \right]; \quad (15)$$

– предел текучести

$$Y = \frac{1}{2} Y_s \left[1 + \cos \left(\pi \left(\omega' (\beta - 1) - \beta \right) \right) \right], \quad (16)$$

где $\omega' = \min(1, \omega/\omega_{кр})$; Y_s, G_s — соответственно предел текучести и модуль сдвига в рассматриваемом напряженно-деформированном состоянии для матрицы сплошной среды; Y, G — предел текучести и модуль сдвига для поврежденной среды.

При расчете гидростатического давления с учетом поврежденности материала используется мера поврежденности только за счет развития пор. Однако при наступлении разрушения из-за сдвиговых деформаций или сдвиговых напряжений материал уже не способен сопротивляться растяжению. Поэтому, если при расчете гидростатического давления его значение становится меньше нуля, необходимо его положить равным нулю.

Отмеченные выше особенности кинетической модели динамического разрушения, включающей пластический рост пор и поврежденность при сдвиговых деформациях, позволяют использовать ее для моделирования работы конструкций, в которых реализуются сложные напряженно-деформируемые состояния при импульсных воздействиях на них.

Компактирование материала после разрушения

Когда материал находится в состоянии разрушения при растягивающих напряжениях, по аналогии с работами [3, 9] вводится в рассмотрение параметр ω — мера поврежденности материала за счет образовавшихся в нем пустот для удельного объема. Предполагается, что в разрушенном состоянии материал распадается на невзаимодействующие между собой фрагменты. Расширение разрушенного материала осуществляется по нулевой изобаре. Если поврежденная среда начинает сжиматься, то происходит процесс необратимых объемных деформаций (*компактирование*) разрушенного материала. Процесс компактирования разрушенного материала зависит от интенсивности давления и его температуры в данный момент времени. Уравнение для моделирования данного процесса представлено в следующем виде:

$$\omega = \frac{1}{2} \omega_0 \left(1 + \cos(\pi a^2) \right), \quad (17)$$

где ω_0 , P_k — параметры модели, соответствующие предельной мере пористости и давлению компактирования; ω — мера поврежденности материала; $a = \min\left(1, \frac{P}{f_1(T) P_k}\right)$, где P — давление в материале с учетом пористости, вычисленное по УРСу поврежденной среды (2); $f_1(T)$ — учет тепловой зависимости по уравнению (7).

Значение ω_0 соответствует предельному уровню поврежденности материала, ниже которого в разрушенном материале начинает проявляться прочность на сжатие. Если происходит *полное* компактирование материала ($\omega = 0$), то далее сжатие идет по ударной адиабате сплошного материала. Здесь учитывается поправка давления компактирования на температуру материала. В этой зависимости учитывается предельный случай: если материал находится в испаренном состоянии, то давление компактирования полагается равным нулю.

При достижении под действием сжимающих напряжений меры поврежденности, равной $\omega_{кр}$, полагается, что происходит частичное восстановление прочностных свойств материала. В дальнейшем расчет напряженно-деформированного состояния в материале уже осуществляется по уравнениям (1)–(15) (где вновь учитываются возможности материала сопротивляться как растяжению и сжатию, так и сдвиговым деформациям).

Компактирование материала, разрушенного из-за сдвиговых деформаций, осуществляется по уравнениям (4) и (12). Здесь следует отметить, что компактирование микротрещин будет происходить при мере поврежденности материала ω меньшей, чем критическая поврежденность $\omega_{кр}$.

Расчет начальной поврежденности материала

Как уже отмечалось, почти в каждой металлической детали есть зародышевые дефекты: вакансии, дислокации, микротрещины, неметаллические включения, усадочные раковины, закалочные трещины и т. д. Также в деталях могут существовать и технологические дефекты, связанные, например, с механической обработкой поверхности при их изготовлении. Поэтому начальная плотность многих материалов при расчете работы конструкций оказывается ниже кристаллической плотности при температуре испытаний. Условно всю совокупность начальных зародышевых дефектов называют *начальной пористостью материала*.

Для численного моделирования функционирования конструкций задаются плотность материала, начальная энергия, УРС и т. д. Если не использовать никаких дополнительных моделей пористой среды, то давление, вычисленное из УРСа при плотности, ниже кристаллической (при комнатной температуре), будет отрицательным, что неизбежно породит волны сжатия, распространяющиеся с внешних границ пористых материалов. Начальные микротрещины в материале ничтожно малы, они не могут в значимой мере влиять на пористость материала. Поэтому при расчете с начальной пористостью материала основной акцент сделан на начальную микроповрежденность материала.

Из решения уравнения (2) при заданной начальной энергии и начальной плотности материала определяется плотность сплошного материала ρ_s . По найденной плотности определяется мера начальной поврежденности (пористости) материала из выражения $\omega_{00} = (\rho_s - \rho) / \rho_s$. Если начальная плотность материала совпадает с кристаллической плотностью, то начальная поврежденность материала ω_{00} полагается равной нулю. Если же дано, что для рассматриваемого материала (даже при плотности, близкой к кристаллической) начальный предел текучести ниже, чем для данного материала при той же плотности по справочным данным, то это может означать, что в нем присутствуют изначальные микротрещины. Данное расхождение можно устранить с помощью задания начальной поврежденности материала по мере поврежденности β . Если для рассматриваемого материала задана начальная пористость и предел текучести (полученный из испытаний, например, на чистый сдвиг), то сначала рассчитывается предел текучести с учетом вычисленной меры поврежденности за счет пор. После этого рассчитывается мера поврежденности β_{00} с учетом ослабления значения предела текучести за счет ω_{00} . Такой подход более адекватно отражает способность условно пористого материала сопротивляться как расширению и сжатию (не завышая его начальных температурных характеристик), так и сдвиговым деформациям. Вычисленные по начальным условиям параметры ω_{00} и β_{00} используются в качестве начальных параметров для мер поврежденности ω и β .

Параметры модели поврежденности материалов

В табл. 1 приведен набор параметров модели зарождения и накопления поврежденности для некоторых материалов, подобранных на основании численного моделирования ударно-волновых воздействий на конструкции. Здесь P_1 — нормированное давление; P_h — пороговое давление, ниже которого в среде не происходит образования новых пор; P_g — пороговое давление, ниже которого в среде не происходит роста пор; η — эффективная вязкость для роста пор; ω_0 — предельная мера поврежденности, начиная с которой материал начинает сопротивляться сжатию; $\omega_{кр}$ — предельная мера поврежденности материала под действием растягивающих напряжений до момента его разрушения; P_k — давление компактирования для разрушенного материала при комнатной температуре; c_n — нормировка для скорости развития разрушения из-за сдвиговых пластических деформаций; ε_0 — предельная сдвиговая деформация для начала развития процесса разрушения из-за сдвиговых деформаций; α — коэффициент нелинейности для сдвиговых разрушений; $\tilde{P}_{ком}$ — давление компактирования микротрещин; l — поправки пороговых параметров на температуру материала. Если положить $l = 0$, то можно проводить численные расчеты учета влияния температуры материала на процессы зарождения и развития его поврежденности. Первые пять эмпирических параметров модели, приведенные в табл. 1 (столбцы 1–5), "отвечают" за поврежденность материала под действием растягивающих напряжений, последующие пять эмпирических параметров (столбцы 6–10) — за поврежденность материала из-за сдвиговых деформаций, последние два (столбцы 11 и 12) — за компактирование разрушенного материала.

Таблица 1

Параметры модели кинетики поврежденности материалов

| 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|----------|---------------|-------------|-------------|---------------|-------------|------------------------|-------|-----------------|----------|-------------------------|------------|-------------|
| Материал | $\omega_{кр}$ | P_h , ГПа | P_g , ГПа | η , Па·с | P_1 , ГПа | τ_0 , 10^{-5} с | c_n | ε_0 | α | $\tilde{P}_{ком}$, ГПа | ω_0 | P_k , ГПа |
| U | 0,15 | 1,25 | 0,1 | 44 | 0,04 | 1 | 3,5 | 0,3 | 0,1 | 24 | 0,43 | 12 |
| Fe | 0,15 | 0,95 | 0,3 | 20 | 0,1 | 1 | 1,5 | 0,3 | 0,1 | 18 | 0,43 | 9 |
| Al | 0,15 | 0,2 | 0,1 | 75 | 0,4 | 1 | 3,5 | 0,55 | 0,1 | 10 | 0,43 | 5 |

Результаты расчетов опытов по нагружению клиновидных образцов

Для оценки применимости феноменологической модели рассматривается численное моделирование экспериментов [16, 17] с клиновидными образцами из сплавов урана с молибденом. Экспериментальные исследования откольной прочности литого сплава проводились во взрывных опытах с варьированием амплитуды и длительности импульса нагрузки. Реализованные условия взрывного нагружения позволили обеспечить в исследуемых образцах как зарождение и развитие поврежденности, так и развитые откольные разрушения. Клиновидная геометрия изучаемого образца позволяет проследить затухание по толщине клина упругого предвестника и пластической волны. Схема экспериментов по исследованию откольных процессов показана на рис. 1. Для модели-

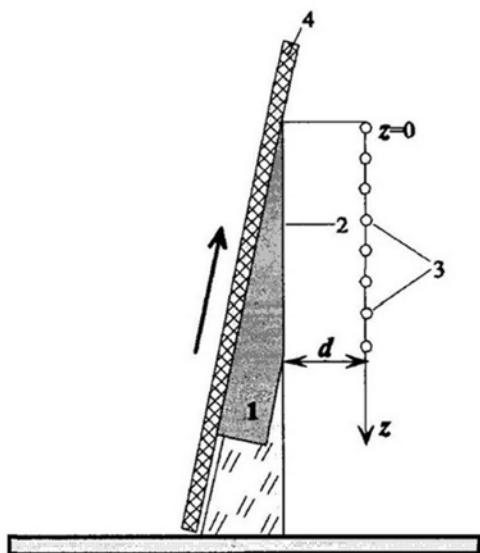


Рис. 1. Схема постановки экспериментов и расчетов по нагружению клиновидных образцов скользящей детонацией слоя ВВ различной толщины: 1 — образец; 2 — полированная свободная поверхность; 3 — система источников света; 4 — слой пластического ВВ; z — направление расположения источников света (вдоль свободной поверхности клиновидного образца, $z = 0$ соответствует минимальной толщине образца)

1,2 мм, на три последовательных момента времени. Раскраску по сформированному полю состояния образца на цветном рисунке следует интерпретировать как дискретные маркеры со следующей расшифровкой: синий цвет — материал не разрушен и находится в упругом состоянии; голубой — материал не разрушен и находится в пластическом состоянии; красный цвет — материал разрушен под действием растягивающих напряжений.

Результаты расчетов показывают, что для нагружаемых клиновидных образцов рассматриваемая кинетическая модель качественно верно передает динамику зарождения и развития поврежденности, приводящую к формированию откольных разрушений. Разрушение образца из-за сдвиговых деформаций в данных расчетах не происходило, но незначительная поврежденность достигалась (менее 10%). Модель кинетики зарождения и развития поврежденности позволяет определять причину возникающих откольных явлений под действием растягивающих напряжений.

рождения термодинамических свойств металлов использовались УРС в форме Ми—Грюнаизена [18] и упругопластическая модель Глушака [19]. Параметры модели поврежденности и разрушения для урана приведены в табл. 1. Для моделирования процессов детонации в пластичном взрывчатом веществе (ВВ) использовалась модель кинетики возбуждения и развития взрывчатого превращения ВВ [20].

В экспериментах и соответствующих им расчетах варьировалась толщина слоя пластического ВВ: 1,2, 1,5 и 2 мм. Увеличение толщины слоя ВВ позволяет увеличивать импульс воздействия на исследуемый образец при сохранении амплитуды входящей в него ударной волны.

В табл. 2 приведено сравнение расчетных данных с экспериментальными по длине неразрушенного участка вблизи свободной поверхности уранового клина при вариации толщины слоя пластического ВВ. Оно показывает, что при толщине слоя ВВ 1,5 и 2 мм расчеты хорошо согласуются с экспериментальными данными (в пределах погрешности измерений в эксперименте). При толщине слоя ВВ, равной 1,2 мм (при более низком импульсе ударно-волнового нагружения) отличие расчетных данных от эксперимента составляет 7%.

На рис. 2 (см. также цветную вкладку) приведены результаты численного моделирования по импульсному нагружению клиновидного образца для толщины слоя пластического ВВ, равной

Длина неразрушенного участка вблизи свободной поверхности клиновидного образца

| УРС | Используемые модели | | $h_{ВВ}$, мм, | L , мм | |
|---------------|---------------------|----------------|----------------|----------|----------------|
| | упругопластическая | поврежденности | | Расчет | Эксперимент |
| Ми—Грюнайзена | Глушака | кинетическая | 1,2 | 30,58 | $33,0 \pm 0,1$ |
| | | | 1,5 | 17,86 | $18,0 \pm 0,1$ |
| | | | 2,0 | -0,06 | $0,0 \pm 0,1$ |

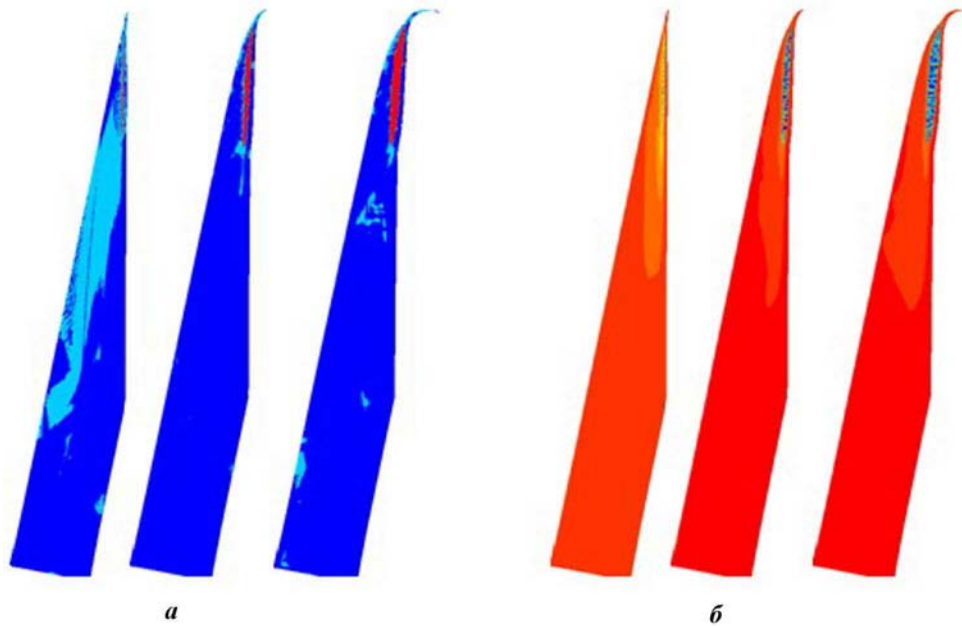


Рис. 2. Формируемые поля состояния материала (а) и поля плотностей (б) в клиновидном образце на различные моменты времени ($t = 13; 15; 17$ мкс). Скорость деформации $2 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$

Результаты расчета модельной задачи со сдвиговыми деформациями

Для иллюстрации применимости модели описания поврежденности и разрушения из-за сдвиговых деформаций была рассмотрена модельная задача о деформации стального диска с заданной до радиуса 5 см начальной скоростью, равной 1 км/с и направленной вдоль оси симметрии OX . Для численного моделирования использовался УРС в форме Ми—Грюнайзена [18] с параметрами $\rho_{s0} = 7,8 \text{ г/см}^3$; $c_0 = 4,9 \text{ км/с}$; $\gamma = 3$; $n = 5$. Для описания упругопластических свойств применялась модель Глушака [19]. Параметры модели разрушения для стали приведены в табл. 1.

На рис. 3, 4 (см. также цветную вкладку) представлены состояния стального диска на последовательные моменты времени. На рис. 3 в цветном исполнении голубым цветом помечен материал, который находится в упругом состоянии; зеленым цветом — материал, который находится в пластическом состоянии; синим — материал, который находится в упругом состоянии после пребывания ранее в пластическом состоянии; красным цветом помечен материал, находящийся в разрушенном состоянии из-за сдвиговых деформаций.

Представленные результаты расчетов показывают, что разрушение материала из-за сдвиговых деформаций произошло по линии разрыва в распределении начальной скорости (где как раз реализуются максимальные сдвиговые деформации). Разрушения и поврежденность материала под действием растягивающих напряжений для рассматриваемого режима импульсного воздействия на образец не формируются.

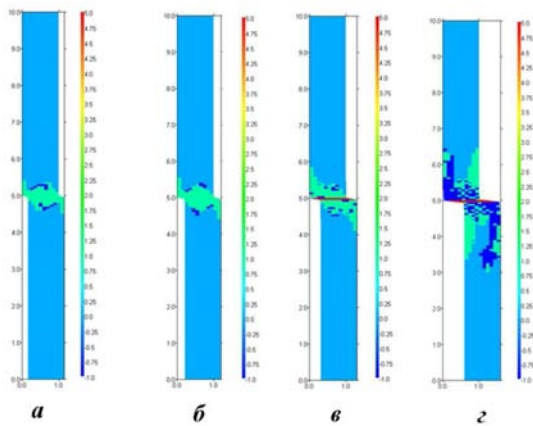


Рис. 3. Состояние системы с использованием модели разрушения на последовательные моменты времени: a — $t = 1,5$ мкс; b — $t = 2$ мкс; v — $t = 3$ мкс; z — $t = 6$ мкс

Из рис. 3 видно, что вблизи границы с разрывом начальной скорости формируются пластические деформации. Область с пластическими деформациями остается локализованной вблизи границы раздела. Видно также, что на момент времени $t = 3$ мкс образовалось разрушение образца из-за сдвиговых деформаций. После этого материал вблизи границы разрушения переходит в упругое состояние (см. рис. 3, z).

На рис. 4 приведены распределения меры поврежденности материала из-за сдвиговых деформаций, которые наглядно демонстрируют, что поврежденность локализована в узкой области (размером в одну ячейку) вблизи границы с разрывом начальной скорости движения. Интенсивность пластической деформации показывает, что область разрушения значительно уже, чем область, подверженная пластическим деформациям.

Результаты расчета опыта по нагружению плоского образца

В качестве демонстрации применимости модели для расчетного описания откольного разрушения при динамическом нагружении плоского образца рассмотрим опыт из работы [13]. Пластина-ударник из алюминия АД1 толщиной 2 мм, летящая со скоростью 0,455 км/с, соударяется с плоским образцом из АД1 толщиной 15 мм. В момент удара обе пластины (ударник и образец) находятся в состоянии *при нормальных условиях*: температура $T_0 = 293$ К; давление $P_0 = 10^{-4}$ ГПа; удельная внутренняя энергия $E_0 = 0$; плотность $\rho_{s0} = 2,71$ г/см³. Для численного моделирования их взаимодействия использовался УРС в форме Ми–Грюнайзена [18] с параметрами: $\rho_{s0} = 2,71$ г/см³; $c_0 = 5,2946$ км/с; $\gamma = 2,1$; $n = 3,5$. Для описания упругопластических свойств применялась модель Глушака [19].

Для описания скорости движения тыльной *свободной* поверхности образца из алюминия было проведено два расчета: с учетом и без учета разрушения алюминия. Параметры модели поврежденности и разрушения для алюминия приведены в табл. 1. На рис. 5 приведено сравнение экспериментальных данных и расчетных зависимостей по скорости движения тыльной поверхности $U(t)$. В работе [13] указано, что толщина откольного слоя в образце составляет $\Delta = 1,95$ мм. Из численного расчета с учетом моделирования процессов развития поврежденности и разрушения получено, что толщина откольного слоя в образце составляет $\Delta = 1,94$ мм.

Из рис. 5 видно, что результаты расчета без учета процессов развития поврежденности материала до момента времени $t = 1,1$ мкс совпадают с результатами расчета с учетом процессов развития поврежденности. Это соответствует тому, что до данного момента в образце не были сформированы

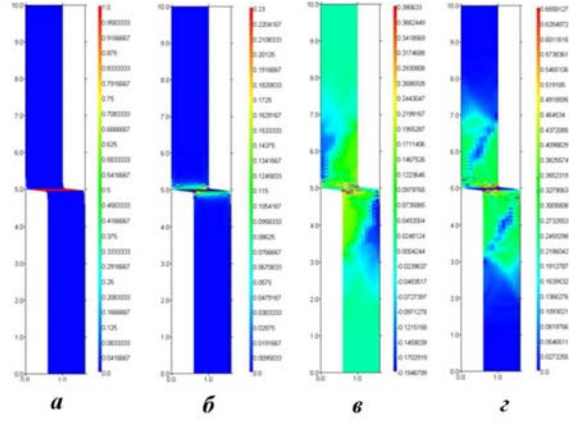


Рис. 4. Состояние системы на момент времени $t = 6$ мкс: a — мера поврежденности из-за сдвиговых деформаций; b — интенсивность пластической деформации в неразрушенном материале; v — девиатор тензора напряжений в направлении оси OX ; z — интенсивность девиатора напряжений

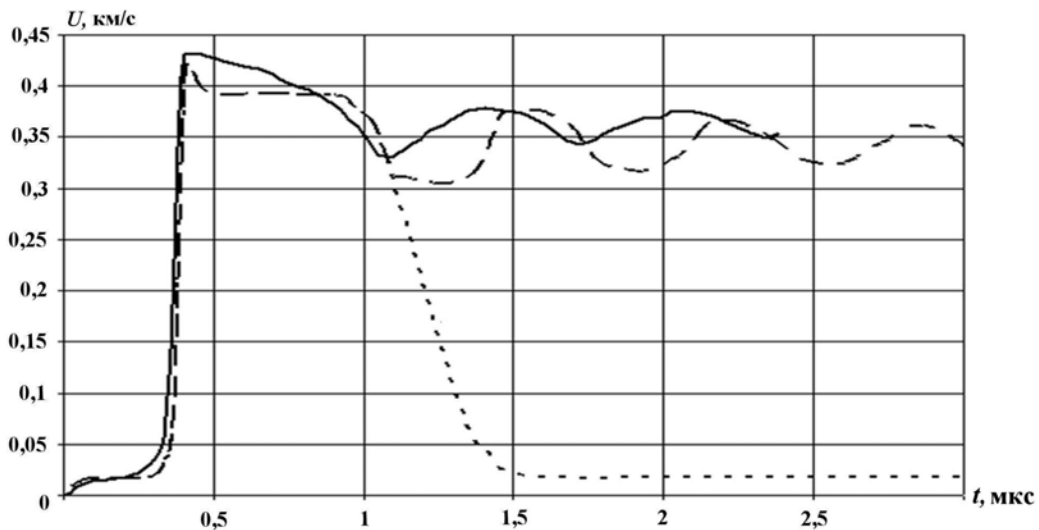


Рис. 5. Скорость движения тыльной свободной поверхности: — — экспериментальные данные [13]; --- — результаты расчетов без учета поврежденности алюминия; - - - — результаты расчетов с учетом поврежденности и разрушения алюминия

условия для зарождения поврежденности. Начиная с этого момента результаты расчетов без учета процессов развития поврежденности расходятся как с результатами расчетов с учетом процессов развития поврежденности, так и с экспериментальными данными. Анализ результатов расчета с учетом моделирования процессов развития поврежденности и разрушения указывает в целом на удовлетворительное описание экспериментальных данных как по толщине откольного слоя, так и по динамике движения свободной поверхности образца.

Заключение

В статье представлено краткое описание одной феноменологической модели зарождения и развития поврежденности твердых материалов при импульсных воздействиях. Модель реализована в рамках методики ТИМ, предназначенной для численного решения нестационарных задач механики сплошных сред на неструктурированных лагранжевых сетках. По методике ТИМ с использованием данной модели были проведены валидационные расчеты с различными импульсными воздействиями на реальные конструкции, некоторые из них приведены в данной работе. Анализ проведенных численных исследований показывает, что предложенная модель кинетики зарождения и развития поврежденности материалов с учетом изменения свойств поврежденного материала в целом удовлетворительно описывает экспериментальные данные, что подтверждает корректность предложенной феноменологической модели.

Список литературы

1. Панин В. Е. Физическая мезомеханика материалов // Механика твердого тела. 1999 № 5. С. 88—102.
2. Seaman L., Curran D., Shockey A. Computational models for ductile and brittle fracture // J. Appl. Phys. 1976. Vol. 47, No. 11. P. 4814—4826.
3. Herrmann W. Constitutive equation for the dynamic compaction of ductile porous materials // Ibid. 1969. Vol. 40, No. 6. P. 2490—2499.
4. Партон В. З., Черепанов Г. П. Механика разрушения. М.: Наука, 1972.

5. Голубев В. К., Новиков С. А. Влияние температуры на критические условия откольного разрушения металлов // ПМТФ. 1980. № 4.
6. Иванов А. Г., Новиков С. А., Тарасов Ю. И. Откольные явления в железе и стали, вызванные взаимодействием ударных волн разрежения // Физика твердого тела. 1962. Т. 4, № 1.
7. Качанов Л. М. Основы механики разрушения. М.: Наука, 1969.
8. Огородников В. А., Пушков В. А., Тюпанова О. А. Основы физики прочности и механики разрушения. Саров: ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009.
9. Огородников В. А., Садовой А. А., Софронов В. Н. и др. Кинетическая модель пластического разрушения с учетом диссипативных процессов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2001. Вып. 2. С. 57–62.
10. Соколов С. С., Садовой А. А. Кинетическая модель динамического разрушения, включающая пластический рост пор и поврежденность при сдвиговой деформации // Тр. конф. "Современные методы проектирования и обработки ракетно-артиллерийского вооружения". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003.
11. Садовой А. А., Соколов С. С., Савельева О. А. Математическое моделирование термомеханического разрушения металлических образцов, подвергнутых воздействию рентгеновского излучения // Тр. конф. "Современные методы проектирования и обработки ракетно-артиллерийского вооружения". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2005.
12. Ioilev A. G., Glushak B. L., Sadovoi A. A. et. al. Numerical model of ductile fracture kinetics // Int. J. of Imp. Eng. 2003. Vol. 29. С. 369–375.
13. Канель Г. И. Сопротивление металлов откольному разрушению // ФГВ. 1982. № 3. С. 77–84.
14. Соколов С. С., Воропинов А. А., Новиков И. Г. и др. Методика ТИМ-2D для расчета задач механики сплошной среды на нерегулярных многоугольных сетках с произвольным количеством связей в узлах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 4. С. 29–43.
15. Соколов С. С., Панов А. И., Воропинов А. А. и др. Методика ТИМ расчета трехмерных задач механики сплошных сред на неструктурированных многогранных лагранжевых сетках // Там же. 2005. Вып. 3. С. 37–52.
16. Козлов Е. А., Панкратов Д. Г., Таржанов В. И. и др. Методы исследования свойств материалов при интенсивных динамических нагрузках // Докл. АН. 2009. Т. 425. Вып. 1. С. 34–39.
17. Козлов Е. А., Панкратов Д. Г., Таржанов В. И., Теличко И. В. // Там же. Т. 426. Вып. 6. С. 769–773.
18. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1968.
19. Новиков А. Б., Глушак Б. Л. Сопротивление металлов пластической деформации при высокоскоростном сжатии // Хим. физика. 2000. Т. 19. С. 65–69.
20. Соколов С. С. Об одной феноменологической модели кинетики разложения гетерогенного ВВ на основе октогена // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 2. С. 50–61.

Статья поступила в редакцию 20.04.12.

УДК 621.375.826

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕРХЗВУКОВОГО ХИМИЧЕСКОГО КИСЛОРОД-ЙОДНОГО ЛАЗЕРА С РАЗЛИЧНЫМИ ВАРИАНТАМИ СМЕШЕНИЯ ПОТОКОВ

Ю. Н. Дерюгин, Б. А. Выскубенко, Д. К. Зеленский, С. П. Ильин,
Ю. В. Колобянин, Е. А. Кудряшов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Приведены результаты численного исследования энергетических характеристик сверхзвукового химического кислород-йодного лазера со смесевыми устройствами различного типа. Для каждого типа смесового устройства определены оптимальные условия, при которых реализуются максимальные энергетические характеристики лазера.

Ключевые слова: химический кислород-йодный лазер, математическая модель, расчетная методика, характеристики генерации излучения, химическая эффективность.

Введение

Одно из направлений в создании технологических лазеров непрерывного действия представляют химические кислород-йодные лазеры (ХКИЛ) со сверхзвуковой прокачкой активной среды через резонатор [1]. Конструктивно ХКИЛ представляет собой генератор синглетного кислорода (СК), связанный со сверхзвуковым резонатором переходным каналом. В лазерах такого типа активная среда образуется в результате смешения энергонесущего газа, содержащего СК, с газом, содержащим молекулы йода. Оптимизация конструкций устройства для смешения потоков, обеспечивающая минимальные потери запасенной энергии, является одной из важных задач при разработке ХКИЛ.

В настоящей работе для исследования структуры неравновесных потоков в смесевых устройствах ХКИЛ и определения энергетических характеристик лазеров создана математическая модель и *трехмерная* расчетная методика. Математическая модель включает в себя основные кинетические процессы в активной среде ХКИЛ и процессы генерации лазерного излучения как в устойчивом, так и неустойчивом резонаторе. *Трехмерная* расчетная методика основана на решении как полных, так и параболизированных уравнений Навье—Стокса и позволяет описывать неравновесные течения до- и сверхзвуковых потоков (в том числе в области резонатора), смешение сверхзвуковых потоков и определять энергетические характеристики лазера.

Целью настоящей работы являются численное исследование энергетических характеристик сверхзвукового ХКИЛ для различных вариантов смесевых устройств в режимах функционирования, приближенных к эксперименту, и выработка рекомендаций для получения максимальных выходных характеристик лазера.

Математическая модель

Система уравнений, используемая для численного моделирования течений в газодинамическом тракте ХКИЛ, может быть записана в виде [2]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0;$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}; \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p) u_j}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{n=1}^N h_n \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial c_n}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j}; \\ \frac{\partial \rho c_n}{\partial t} + \frac{\partial \rho c_n u_j}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial c_n}{\partial x_j} \right) + \rho \omega_n; \quad n = 1, 2, \dots, N.\end{aligned}$$

Здесь ρ — плотность; u_i — i -я компонента вектора скорости; p — давление; τ_{ij} — компонента тензора вязких напряжений; E — полная энергия; T — температура; h — удельная энтальпия; c_n — весовая концентрация n -го компонента смеси газов; χ — коэффициент теплопроводности; μ — коэффициент динамической вязкости. Член ω_n описывает изменения концентрации n -го компонента за счет химических реакций в смеси газов, состоящей из следующих компонентов: $O_2(X^3 \Sigma_g)$, $O_2(a^1 \Delta_g)$, $O_2(b^1 \Sigma_g)$, I_2 , $I_2(20 \leq v \leq 40)$, $I(^2P_{3/2})$, $I(^2P_{1/2})$, Cl , Cl_2 , ICl , H_2O , N_2 , He .

Отметим, что в настоящей работе используется модель кинетики процессов в активной среде ХКИЛ без учета влияния электронно-возбужденного молекулярного йода. Модель основана на результатах работы [3].

Система уравнений замыкается термическим и калорическим уравнениями состояния

$$T = \frac{mp}{R\rho}; \quad h = \sum_{n=1}^N C_{P_n} c_n (T - T_0) + \Delta h_n c_n,$$

выражениями для компонент тензора вязких напряжений

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \rho k_t \delta_{ij}$$

и зависимостями для ламинарной и турбулентной вязкостей. Коэффициент теплопроводности и ламинарная вязкость определяются по формуле Саттерленда [2]. Для определения турбулентной вязкости используется двухпараметрическая дифференциальная модель, описанная в работах Потанкара и Сполдинга (см., например, [4]) и основанная на дифференциальных соотношениях для турбулентной кинетической энергии k_t и скорости диссипации турбулентной энергии ε_t :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho k_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j k_t}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_l + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k_t}{\partial x_j} \right] + P_t - \rho \varepsilon_t; \\ \frac{\partial \rho \varepsilon_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \varepsilon_t}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_l + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon_t}{\partial x_j} \right] + C_1 \frac{\varepsilon_t}{k_t} P_t - C_2 \frac{\rho \varepsilon_t^2}{k_t} - C_3 \rho \varepsilon_t \frac{\partial u_j}{\partial x_j},\end{aligned}$$

где

$$P_t = \mu_t \left[2 \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right)^2 \right] - \frac{2}{3} \rho k_t \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right).$$

Эффективная турбулентная вязкость в данной модели определяется согласно выражению $\mu_t = \rho C_\mu k_t^2 / \varepsilon_t$, а универсальные константы имеют следующие значения: $C_\mu = 0,09$; $\sigma_k = 1$; $\sigma_\varepsilon = 1,22$; $C_1 = 1,44$; $C_2 = 1,92$; $C_3 = 0,33$.

Для расчета мощности генерации ХКИЛ применяется модель, в которой форма распределения интенсивности по потоку является заданной (например из эксперимента), а амплитуда подбирается, как и в модели постоянной интенсивности (см., например, [5]), исходя из соблюдения условия стационарной генерации. Пороговое условие с учетом непостоянства кинетических параметров вдоль оси резонатора записывается в виде

$$\dot{P}(A) = \int_S J(x) \bar{k} \frac{r_1 r_2 \bar{k}}{(r_1 e^{\bar{k}L} + 1)(e^{\bar{k}L} - 1)} dS = 0,$$

где S — площадь зеркала; \bar{k} — коэффициент усиления; J — интенсивность; r_1, r_2 — коэффициенты отражения зеркал; L — длина оптической оси резонатора. Интенсивность излучения $J(x)$ задается в форме $J = AJ_0(x)$, где $J_0(x)$ — заданная функция распределения интенсивности, A — амплитуда.

Метод решения

Типичная схема ХКИЛ приведена на рис. 1. В генераторе СК формируется *энергонесущий* газовый поток, содержащий СК, который по каналу подается в смесевое устройство. В смесевом устройстве осуществляется инжекция в энергонесущий поток паров молекулярного йода с буферным газом-носителем (например, гелием или азотом). Инжекция осуществляется либо со стенок сопловых решеток, либо с помощью центрального тела с трубчатым инжектором. В результате перемешивания энергонесущего и рабочего потоков образуется активная среда, которая поступает в лазерный резонатор, где создаются условия самовозбуждения оптического квантового генератора.

Трехмерные неравновесные течения во всем тракте ХКИЛ определяются в результате последовательного решения ряда задач [5–7]. В каждой из задач находятся параметры поля течения в одной из областей газодинамического тракта. Полученное решение затем может использоваться для постановки начальных данных следующей задачи. Разбиение расчетной геометрии на области и последовательность решения задач осуществлялись исходя из рассматриваемой конструкции смесевого устройства лазера, характера течения и применяемой для описания течения системы уравнений.

Первой задачей является определение стационарных до- и трансзвуковых течений невязкого многокомпонентного газа в сопле Лавала с центральным телом. Такие течения описываются системой уравнений смешанного типа: эллиптического типа — в дозвуковой области течения, параболического — на звуковой линии и гиперболического — в сверхзвуковой области течения. Один из методов решения систем смешанного типа состоит в переходе к нестационарным уравнениям и применении метода установления по времени. Численно нестационарные уравнения Эйлера с учетом кинетики химических реакций интегрируются на эйлеровой сетке конечно-разностным методом с использованием расщепления по физическим процессам. Счетный шаг расщепляется на два этапа. На первом этапе решаются уравнения Эйлера методом Годунова [8]. На этом этапе кинетика считается "замо-

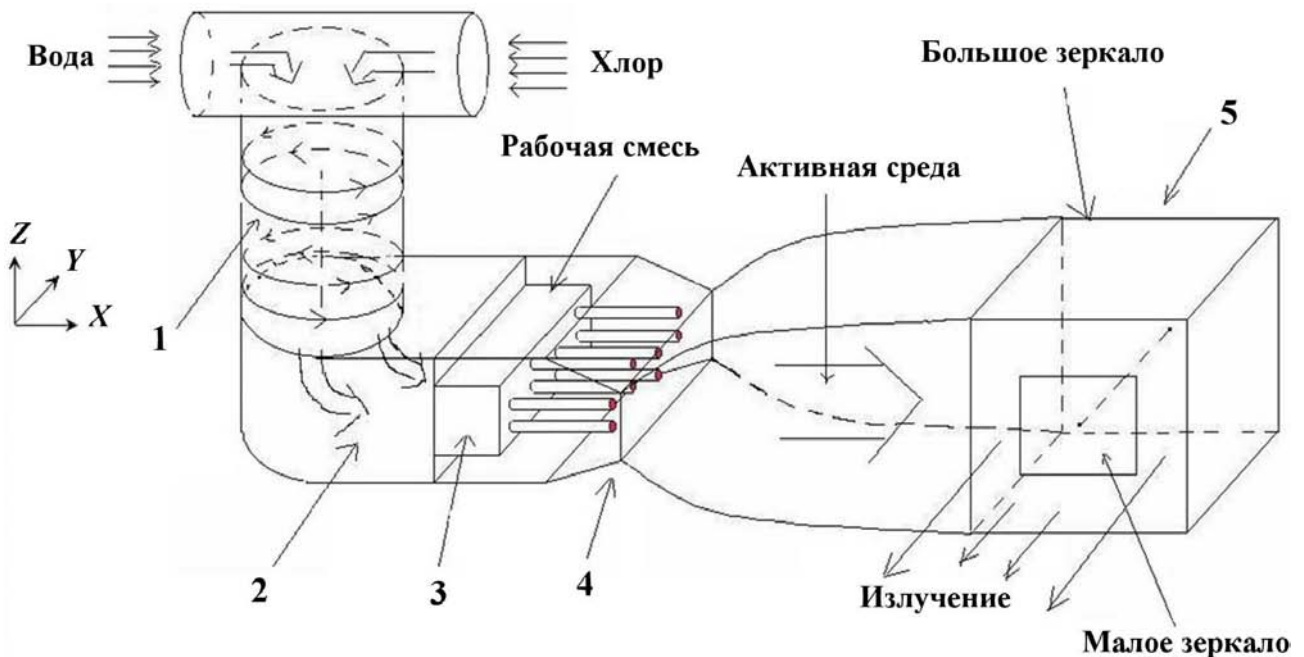


Рис. 1. Схема ХКИЛ: 1 — генератор СК; 2 — дозвуковой канал; 3 — смесевое устройство; 4 — сопло для формирования сверхзвукового потока; 5 — резонатор

роженной". Параметры на гранях ячеек определяются из решения задачи о распаде произвольного разрыва. Для ее решения используется подход, описанный в работе [9]. На втором этапе в каждой точке разностной сетки определяется изменение массовых концентраций за счет химических реакций. Уравнения химической кинетики интегрируются с использованием неявной разностной схемы с весами. Выход на стационарное решение определяется по изменению параметров потока в критическом сечении сопла. Считается, что сходимость в решении достигнута, если относительные изменения расхода газа и параметров потока не превышают заданной точности (обычно полагается $\varepsilon_0 = 10^{-3}$).

Вторая задача — расчет перемешивания потоков. Течения здесь описываются на основе полных либо параболизированных уравнений Навье—Стокса. Алгоритм расчета вязких течений во многом аналогичен алгоритму расчета невязких течений. Конвективные потоки здесь также определяются в результате решения задачи о распаде разрыва. Компоненты тензора вязких напряжений и вязкие потоки аппроксимируются по параметрам с нижнего слоя с использованием центральных разностей. Основное отличие состоит в том, что расчет ведется на подвижной сетке, которая подстраивается под линии тока. При расчете течений на основе полных уравнений новое положение узлов сетки в ортогональных к оси сопла направлениях y и z определяется на каждом шаге по формулам

$$y_j^{n+1} = y_j^n + \tau \left(\left(\frac{v}{u} \right)_j^n - \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} \right)_j^n \right); \quad z_j^{n+1} = z_j^n + \tau \left(\left(\frac{w}{u} \right)_j^n - \left(\frac{\Delta z}{\Delta x} \right)_j^n \right).$$

При расчете вязких течений маршевым методом на основе параболизированных уравнений Навье—Стокса боковые грани ячеек совмещаются с контактным разрывом. Параметры на контактном разрыве определяются в результате решения задачи о распаде разрыва при взаимодействии сверхзвуковых потоков [8]. Граничные условия для энергонесущего потока берутся из расчета до- и трансзвукового течений. Параметры инжектируемой смеси на срезе трубок инжектора соответствуют числу Маха $M = 1$.

Следующей задачей является определение энергетических характеристик лазерной установки из совместного решения уравнений стационарной генерации (модель постоянного коэффициента усиления, модель постоянной интенсивности, модель неустойчивого резонатора) и параболизированных уравнений Навье—Стокса.

Значение интенсивности находится итерациями (методом стрельбы) из условия стационарной генерации. Последовательность вычислений на каждой итерации состоит в следующем. Задаются некоторая форма распределения интенсивности (например из эксперимента) в зависимости от маршевой координаты и ее амплитуда. Затем рассчитывается течение смеси газов в области резонатора. По найденному полю течения вычисляется значение для порогового условия, отвечающее заданной интенсивности. Этим завершается один цикл итерации. Если пороговое условие не выполняется, то предсказывается новое значение амплитуды и делается следующая итерация.

Значение амплитуды в процессе итераций определяется по следующему алгоритму. На первой итерации рассчитывается течение в неработающем резонаторе. Если при этом усиление сигнала будет превышать потери, что означает возможность стационарной генерации, амплитуда интенсивности на второй итерации задается из условия, что вся запасенная энергия в СК переходит полностью в излучение. При таком значении амплитуды решение оказывается заключенным в «вилку». На последующих итерациях значение амплитуды определяется линейной или квадратичной интерполяцией.

Результаты расчетов

С использованием расчетных методик были проведены исследования процесса образования активной среды в сверхзвуковом ХКИЛ с различными конструкциями смесевых устройств.

Трехрядный трубчатый инжектор. Поперечный разрез смесевого устройства данного типа приведен на рис. 2. Контур сверхзвуковой части сопла рассчитан методом характеристик. Инжекция рабочего газа производится через трубчатый инжектор. Трубки расположены в шахматном

порядке в три ряда. Внешний диаметр трубок 0,07 см, внутренний диаметр 0,05 см. Инжекция йода с газом-носителем (азотом) осуществляется в области сверхзвукового потока на расстоянии 0,2 см от критического сечения сопла. На срезе трубки течение инжектируемой струи соответствует числу Маха $M = 1$.

Расчеты перемешивания потоков были выполнены для одного периодического элемента расположения трубок инжектора. На рис. 3 представлен элементарный фрагмент расчетной схемы в плоскости инъекции рабочего потока.

В первых расчетах численно исследовалась зависимость энергетических характеристик от состава рабочего газа. В этих расчетах две инжекционные трубки располагались на расстоянии $\Delta L = \pm 0,1$ см по вертикали от горизонтальной плоскости симметрии элементарного фрагмента (см. рис. 3). Длина оптической оси резонатора 60 см; коэффициент отражения выходного зеркала $r_1 = 0,9$; коэффициент поглощения выходного зеркала $\delta_{\text{вых}} = 0,002$; коэффициент отражения глухого зеркала $r_2 = 0,998$. Резонатор расположен на расстоянии 4,2 см от критического сечения. Размер зеркал 10×10 см. Молярное содержание йода в газе-носителе варьировалось в диапазоне от 0,005 до 0,2. Отношение расходов рабочего и энергонесущего потоков $S_{\text{раб}}/S_{\text{эн}}$ изменялось в диапазоне $0,145 \div 0,251$.

Результаты расчетов энергетических характеристик приведены в табл. 1. Отметим, что в этой и последующих таблицах приводятся лишь те значения молярного содержания йода, при которых реализуется генерация излучения (при малом содержании может не достигаться порог генерации, а при большом возможно *запирание* потока из-за нагрева). Как видно из представленных результатов, максимальные значения удельного энергосъема $E_{\text{ген}}$, мощности излучения P (приведенной мощности W) и химической эффективности χ реализуются для инжектируемой струи, содержащей в буферном газе 1,5% молекулярного йода. Для этого состава $P = 70$ кВт, $\tilde{E}_{\text{ген}} = 172$ Дж/г и $\chi \approx 21\%$.

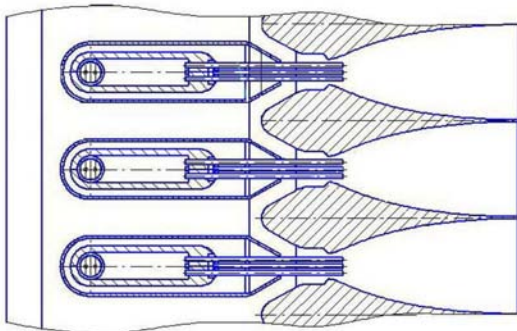


Рис. 2. Схема трехрядного трубчатого инжектора

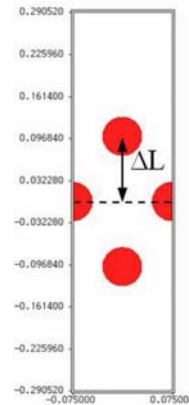


Рис. 3. Элементарный фрагмент расчетной схемы в плоскости инъекции рабочего газа

Таблица 1

Зависимость энергетических характеристик лазера от содержания йода α_{I_2} в инжектируемом газе для трехрядного трубчатого инжектора

| α_{I_2} | P , кВт | W , Вт/см ² | $E_{\text{ген}}$, Дж/г | χ |
|----------------|-----------|--------------------------|-------------------------|--------|
| 0,01 | 65 | 108,3 | 161 | 0,194 |
| 0,015 | 70 | 116,7 | 172 | 0,209 |
| 0,02 | 68,3 | 113,8 | 168,4 | 0,204 |
| 0,025 | 65,9 | 109,8 | 162,1 | 0,197 |
| 0,03 | 62 | 103,3 | 152,2 | 0,185 |
| 0,04 | 50,4 | 84 | 123,1 | 0,150 |
| 0,05 | 38,6 | 64,3 | 93,7 | 0,115 |

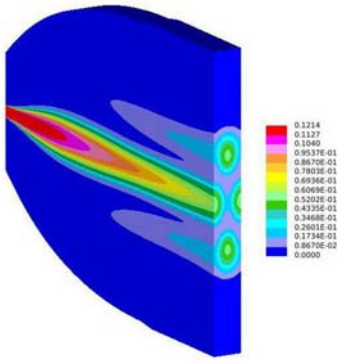


Иллюстрация перемешивания энергонесущего и рабочего потоков для состава рабочей смеси $0,015 I_2 + 0,985 N_2$ приводится на рис. 4 (см. также цветную вкладку), где показаны изоповерхности концентрации молекулярного йода. Из полученных результатов следует, что на входе в резонатор имеются значительные градиенты в распределениях концентраций молекулярного йода и СК. Около 30 % СК не участвует в образовании активной среды. При малом содержании йода ($\alpha_{I_2} < 0,005$) не достигается условие стационарной генерации при заданных характеристиках резонатора. При большом содержании йода ($\alpha_{I_2} > 0,05$) в инжекционных струях за счет повышенной релаксации СК происходит нагрев потока и образование локальных дозвуковых зон, что, в конечном счете, приводит к запариванию потока.

Рис. 4. Изоповерхности концентрации молекулярного йода при использовании трехрядного трубчатого инжектора

Для инжектируемого потока, имеющего молярный состав $0,015 I_2 + 0,985 N_2$, была исследована зависимость энергетических характеристик от места инъекции рабочего газа. Расчеты проведены для различных положений инжекционных трубок ΔL относительно

горизонтальной плоскости симметрии (см. рис. 3). Результаты представлены в табл. 2, откуда видно, что расположение инжекционных трубок существенно влияет на степень перемешивания энергонесущего и рабочего потоков, что, в свою очередь, определяет энергетические характеристики. При шахматном расположении инжекционных трубок для данной конструкции смесового устройства существует оптимальное расположение, соответствующее $\Delta L = 0,2$ см, при котором струйки более равномерно распределены по площади потока. В этом случае увеличивается объем энергонесущего газа, участвующего в перемешивании, и соответственно повышаются энергетические характеристики лазера. При оптимальном расположении трубок инжектора химическая эффективность достигает $\approx 35\%$, а удельный энергосъем ≈ 276 Дж/г. Для иллюстрации на рис. 5 (см. также цветную вкладку) показаны распределения концентрации СК в поперечном сечении расчетного элемента на входе в резонатор для различных положений инжекционных трубок.

Таблица 2

Зависимость энергетических характеристик лазера от положения инжектируемых струй в трехрядном трубчатом инжекторе

| ΔL , см | P , кВт | W , Вт/см ² | $E_{ген}$, Дж/г | χ |
|-----------------|-----------|--------------------------|------------------|--------|
| 0,05 | 29,2 | 48,7 | 83,3 | 0,103 |
| 0,1 | 70 | 116,7 | 172 | 0,209 |
| 0,15 | 90,8 | 151,3 | 255,1 | 0,320 |
| 0,2 | 98,9 | 164,8 | 275,4 | 0,349 |

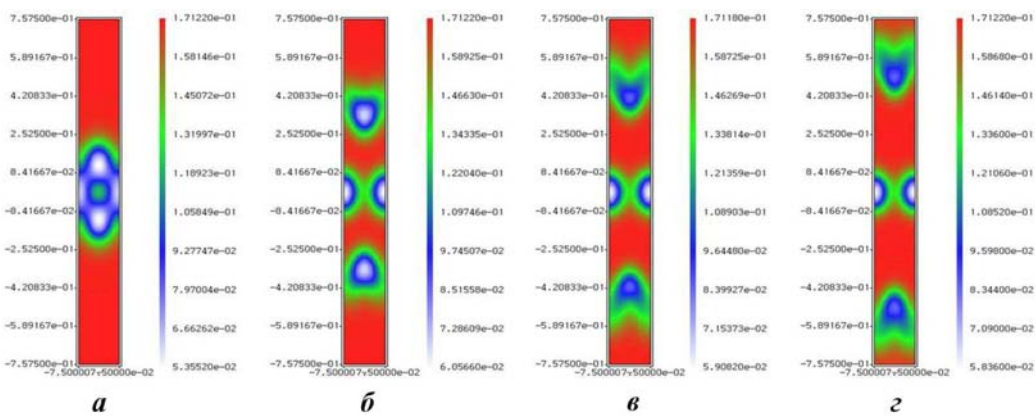


Рис. 5. Распределения концентрации СК на входе в резонатор в случае трехрядного трубчатого инжектора: а – $\Delta L = 0,05$ см; б – $\Delta L = 0,1$ см; в – $\Delta L = 0,15$ см; з – $\Delta L = 0,2$ см

Однорядный трубчатый инжектор. Поперечный разрез элемента смесового устройства данного типа приведен на рис. 6. Используются те же сопловые лопатки, что и в предыдущем устройстве. Инжекция рабочего газа производится через трубчатый инжектор. Трубки расположены в плоскости симметрии сопла в один ряд. Рассмотрены два варианта инжектора. Первый инжектор содержит в одном сопле 62 трубки с внешним диаметром 0,11 см и внутренним диаметром 0,0866 см. Второй содержит 22 трубки с внешним и внутренним диаметром 0,27 и 0,2 см соответственно. Диаметр трубок выбран так, что расход через одну трубку в этом инжекторе эквивалентен расходу через три трубки в трехрядном трубчатом инжекторе. Численно исследовалась зависимость энергетических характеристик от состава рабочего газа.

При рассмотрении первого варианта инжектора молярное содержание йода в газе-носителе (азоте) варьировалось в диапазоне от 0,005 до 0,2. Результаты расчетов энергетических характеристик лазера с инжектором с 62 трубками (только варианты с генерацией излучения) приведены в табл. 3. Из результатов следует, что максимальные значения энергосъема, мощности излучения и химической эффективности реализуются для инжектируемой струи, содержащей в буферном газе 1,5 % молекулярного йода. Для этого состава $P = 18,1$ кВт; $E_{ген} = 44,3$ Дж/г; $\chi = 5,3$ %.

Иллюстрация картины перемешивания энергонесущего и рабочего потоков для состава рабочей смеси $0,015 I_2 + 0,985 N_2$ приводится на рис. 7 (см. также цветную вкладку), где показаны изоповерхности концентрации СК. Как видно из этого рисунка, на входе в резонатор потоки практически не перемешаны. Около 80 % СК не участвует в образовании активной среды.

Для инжектируемого потока, имеющего молярный состав $0,015 I_2 + 0,985 N_2$, исследовалась зависимость энергетических характеристик от места инъекции рабочего потока. Были проведены расчеты для четырех различных положений инъекционных трубок. Из полученных результатов следует, что расположение инъекционных трубок для однорядного инжектора слабо влияет на степень перемешивания потоков и соответственно на параметры генерации.

Для следующего варианта соплового устройства с однорядным инжектором, с трубками большого диаметра (22 трубки на сопло, внешний и внутренний диаметры 0,27 и 0,2 см), молярное содержание йода в буферном газе (азоте) варьировалось в диапазоне от 0,005 до 0,05. Отношение расходов рабочего и энергонесущего потоков ($S_{раб}/S_{эн}$) в зависимости от содержания молекулярного йода для этого сопла изменялось в диапазоне $0,355 \div 0,455$. Результаты расчетов энергетических характеристик (только варианты с генерацией излучения) представлены в табл. 4.

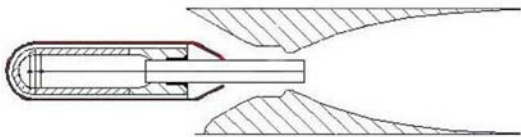


Рис. 6. Схема однорядного трубчатого инжектора

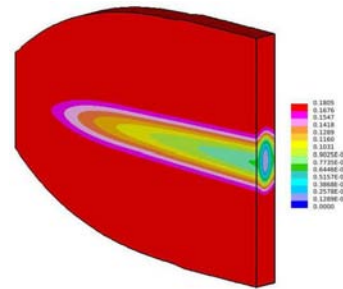


Рис. 7. Изоповерхности концентрации СК при использовании однорядного инжектора с 62 трубками

Таблица 3

Зависимость энергетических характеристик лазера от содержания йода α_{I_2} в инжектируемом газе для однорядного инжектора с 62 трубками

| α_{I_2} | P , кВт | W , Вт/см ² | $E_{ген}$, Дж/г | χ |
|----------------|-----------|--------------------------|------------------|--------|
| 0,01 | 16 | 26,7 | 39,3 | 0,047 |
| 0,015 | 18,1 | 30,2 | 44,3 | 0,053 |
| 0,02 | 16 | 26,7 | 39,1 | 0,047 |
| 0,025 | 9,8 | 16,3 | 25,9 | 0,029 |

Зависимость энергетических характеристик лазера от содержания йода α_{I_2} в инжектируемом газе для однорядного инжектора с 22 трубками

| α_{I_2} | P , кВт | W , Вт/см ² | $E_{\text{ген}}$, Дж/г | χ |
|----------------|-----------|--------------------------|-------------------------|--------|
| 0,01 | 36,1 | 60,2 | 86,7 | 0,124 |
| 0,015 | 38,5 | 64,2 | 91,9 | 0,132 |
| 0,02 | 31,6 | 52,7 | 75,2 | 0,108 |
| 0,025 | 19,5 | 32,5 | 31,8 | 0,065 |

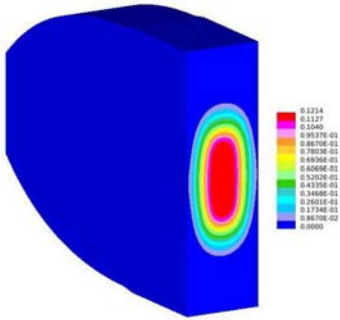


Рис. 8. Изоповерхности концентрации молекулярного йода в случае однорядного инжектора с 22 трубками

Из полученных результатов следует, что максимальные значения характеристик лазера реализуются для инжектируемой струи, содержащей 1,5 % молекулярного йода. В этом случае мощность излучения составляет 38,5 кВт, удельный энергосъем ≈ 92 Дж/г, химическая эффективность 13,2 %.

Иллюстрация картины перемешивания приводится на рис. 8 (см. также цветную вкладку), где иллюстрируется форма струи молекулярного йода до входа в резонатор. Видно, что на входе в резонатор потоки не перемешаны. Около 40 % СК не участвует в образовании активной среды. Для этого варианта отношение расходов рабочего и энергонесущего потоков более чем в два раза выше по сравнению с трехрядным инжектором. За счет большого содержания молекулярного йода происходит более сильная релаксация СК, приводящая к нагреву и торможению потока. Значительная часть струи, содержащей молекулярный йод, не перемешана с энергонесущим потоком.

Плоский инжектор в критическом сечении сопла. Поперечные разрезы элемента смесового устройства данного типа приведены на рис. 9. В этом устройстве инжекция рабочего газа производится под углом около 9° к плоскости симметрии сопла через прямоугольные отверстия размером $0,06 \times 0,1$ см инжектора, расположенного в дозвуковой области соплового блока. Далее инжектируемые струи расширяются в закритическую область сопла через прямоугольные каналы, выполненные в стенках сопловых лопаток и проходящие через критическое сечение (сопловая лопатка типа *расческа*). Каналы на противоположных инжекторах расположены в шахматном порядке. Ширина каналов и расстояние между ними 0,1 см.

Для этого устройства, как и для предыдущих, численно исследовалась зависимость энергетических характеристик от состава рабочего газа. Молярное содержание йода в газе-носителе (азоте) варьировалось в диапазоне от 0,005 до 0,04. Отношение расходов рабочего и энергонесущего потоков $S_{\text{раб}}/S_{\text{эн}}$ в зависимости от содержания молекулярного йода для этого сопла изменялось в диапазоне $0,538 \div 0,59$.

Результаты расчетов энергетических характеристик (только варианты с генерацией излучения) представлены в табл. 5. Максимальная мощность и химическая эффективность составили соответственно ≈ 70 кВт и 19,6 %. На рис. 10 (см. также цветную вкладку) показано поле концентрации СК.

Из полученных результатов следует, что на начальном участке перемешивания косые скачки уплотнения и волны разрежения, образующиеся при взаимодействии потоков, деформируют струю, увеличивая площадь взаимодействия рабочего и энергонесущего потоков. В этой области происходит наиболее эффективное формирование активной среды. На входе в резонатор неоднородности в газодинамических параметрах (давлении, температуре и числе Маха) не превышают 20 %. В то же время часть инжектируемой струи практически еще не охвачена перемешиванием. Для данной конструкции смесового устройства отношение расходов рабочего и энергонесущего потоков составляет $\sim 0,5$. Оптимальные значения энергетических характеристик достигаются при содержании в

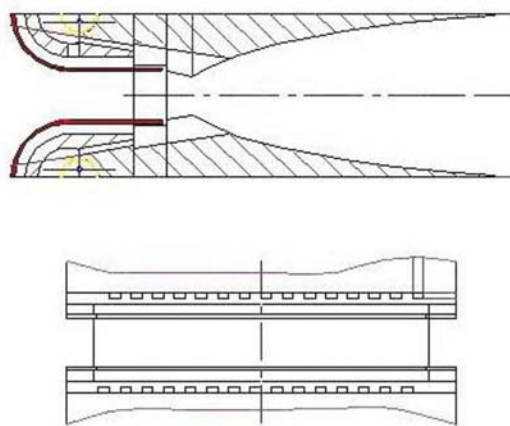


Рис. 9. Схема смесового устройства с инъекцией йода в критическом сечении (сопловая лопатка типа расческа)

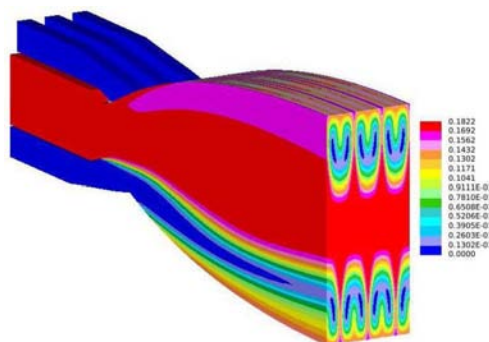


Рис. 10. Распределение концентрации СК в случае плоского инжектора в критическом сечении сопла

Таблица 5

Зависимость энергетических характеристик лазера от содержания йода α_{I_2} в инжектируемом газе для плоского инжектора

| α_{I_2} | P , кВт | W , Вт/см ² | $E_{ген}$, Дж/г | χ |
|----------------|-----------|--------------------------|------------------|--------|
| 0,005 | 69,4 | 115,7 | 118,8 | 0,196 |
| 0,01 | 58,2 | 97 | 100,8 | 0,164 |

рабочем потоке от 0,5 до 1 % молекулярного йода. В этом случае основная наработка активной среды происходит в области резонатора. При большом содержании йода наработка активной среды и релаксация запасенной энергии происходят на начальном участке взаимодействия потоков. Это приводит к нагреву и торможению потока.

Инжекция со стенок сопловых лопаток в сверхзвуковой области. Данная конструкция соплового блока интересна тем, что экспериментально получена высокая (33 %) химическая эффективность ХКИЛ [10]. Как и в предыдущем случае, смесовое устройство не загромождает дозвуковую область и критическое сечение сопла трубками и центральным телом инжектора, и должны быть меньшие потери СК при транспортировке к области смешения с йодом.

Инжекция рабочего газа производилась через цилиндрические каналы (отверстия) в сопловых лопатках, расположенных на расстоянии 0,2 см от критического сечения в области сверхзвукового потока (рис. 11). Каналы на противоположных сопловых лопатках расположены в шахматном порядке. Диаметр отверстий 0,05 см, расстояние между отверстиями 0,1 см. Оси инжекционных отверстий направлены по нормали к стенкам сопла в точках инъекции.

Расчеты перемешивания потоков и энергетических характеристик были проведены для различных составов рабочего газа. Молярное содержание йода в газе-носителе (азоте) варьировалось в диапазоне 0,01 ÷ 0,03.

Результаты расчетов энергетических характеристик представлены в табл. 6, из которой видно, что мощность генерации и химическая эффективность растут с увеличением содержания йода в инжектируемом газе. Максимальная мощность составила 74,9 кВт, а химическая эффективность 0,229. Для данной конструкции смесового устройства оптимальные энергетические характеристики лежат в области $\approx 3 \div 5$ % содержания молекулярного йода в рабочем потоке. Смешение потоков иллюстрирует рис. 12 (см. также цветную вкладку), где показано поле концентрации СК.

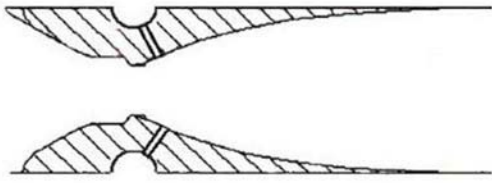


Рис. 11. Схема смесового устройства с инъекцией йода со стенок сопловых лопаток в сверхзвуковой области

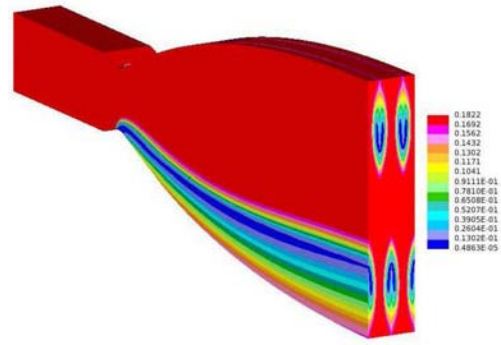


Рис. 12. Распределение концентрации СК при инъекции йода со стенок сопловых лопаток

Таблица 6

Зависимость энергетических характеристик лазера от содержания йода α_{I_2} в инжектируемом газе при инъекции йода со стенок сопловых лопаток

| α_{I_2} | P , кВт | W , Вт/см ² | $E_{ген}$, Дж/г | χ |
|----------------|-----------|--------------------------|------------------|--------|
| 0,01 | 43,4 | 72,3 | 117,7 | 0,132 |
| 0,015 | 67 | 111,7 | 177,6 | 0,205 |
| 0,02 | 72,2 | 120,3 | 192,3 | 0,220 |
| 0,03 | 74,9 | 124,8 | 196,3 | 0,229 |

Общие выводы

Как известно, одним из важнейших процессов, определяющих эффективность работы ХКИЛ, является смешение энергонесущего (СК с буферным азотом) и излучающего (молекулярного йода с газом-носителем) газов. Требования к процессу смешения очень противоречивы. С одной стороны, для формирования активной среды необходимо смешать компоненты как можно быстрее, что, в свою очередь, приводит к быстрому росту температуры за счет релаксационных процессов и снижению запасенной энергии и коэффициента усиления активной лазерной смеси в области резонатора. Ускорение смешения обеспечивается использованием мелкомасштабной структуры потоков и подходящей геометрией смесового устройства. С другой стороны, для обеспечения максимальной запасенной энергии в области резонатора смешение компонентов должно быть затянуто по времени. В этом случае в области резонатора будем иметь активную среду с большой неоднородностью по запасенной энергии и коэффициенту усиления активной среды, что снижает характеристики генерации и отрицательно сказывается на расходимости лазерного излучения. Таким образом, для получения максимальной мощности излучения лазера необходимо оптимизировать параметры рабочей среды, масштаб смешения и положение резонатора.

С точки зрения расчетного моделирования наиболее трудоемкой является оптимизация параметров энергонесущего газа, поскольку для каждого набора параметров необходимо рассчитывать трехмерное нестационарное до- и трансзвуковое течение, что требует больших затрат счетного времени. Поэтому для расчетного моделирования выходных энергетических характеристик были выбраны параметры энергонесущего газа, соответствующие только одной характерной экспериментальной точке. В такой ситуации результаты, полученные при варьировании других параметров (состава инжектируемого газа, геометрии смешения, коэффициента отражения выходного зеркала резонатора), являются не совсем точными. Строго говоря, для каждого варианта смесового устройства необходимо проводить многофакторную оптимизацию. Только тогда можно получить более объективную информацию и сделать более определенные выводы. Поэтому приводимые здесь выводы и рекомендации следует рассматривать как предварительные. Тем не менее полученные результаты позволяют определить направления, в которых необходимо проводить дальнейшие исследования.

Из анализа полученных результатов можно сделать вполне определенные выводы. Видно, что ни одно из исследованных смесевых устройств не обеспечивает хорошего качества смешения потоков на длине сопловой лопатки. Значительное количество СК (до 30–50 %) не перемешивается с молекулярным йодом и выносится из соплового блока. Хотя ниже по потоку газа смешение йода с СК продолжается, но, как показывают результаты расчетов, даже для самого лучшего смесового устройства с трехрядным инжектором йода около 20 % СК выносится из резонатора и не участвует в формировании активной лазерной среды. Тем не менее даже в этих условиях исследованные перспективные варианты смесевых устройств обеспечивают мощность излучения лазера 70–75 кВт при химической эффективности 20–23 %.

Наблюдается хорошая корреляция и при сравнении результатов расчета с экспериментальными данными [11]: эксперимент — 90 кВт при химической эффективности около 32 %, расчет — 99 кВт при химической эффективности около 35 %.

Заключение

Численно исследованы энергетические характеристики сверхзвукового ХКИЛ со смесевыми устройствами различных типов. Для каждого типа смесового устройства определены оптимальные условия по геометрии и составу инжектируемого газа, при которых реализуются максимальные энергетические характеристики лазера. Показано, что все рассмотренные конфигурации смесевых устройств применимы и позволяют получить достаточно высокие энергетические характеристики ХКИЛ. Максимальные характеристики в настоящее время получены для соплового блока с трехрядным трубчатый инжектором: мощность излучения около 99 кВт, удельный энергосъем 300 Дж/г, химическая эффективность 35 %, что хорошо согласуется с достигнутыми экспериментальными результатами.

Список литературы

1. Басов Н. Г., Загидуллин М. В., Игошин В. И. и др. Теоретический анализ химических кислородно-йодных лазеров // Труды ФИАН. 1986. Т. 171. С. 30–53.
2. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 1970.
3. Бобровский В. В., Дидюков А. И., Кулагин Ю. А. и др. Скорости гомогенных и гетерогенных процессов с участием молекул синглетного кислорода: Препринт № 206. М.: ФИАН, 1988.
4. Launder B. V., Spalding D. B. Lectures on Mathematical Model of Turbulence. London—New-York: Acad. Press, 1972.
5. Выскубенко Б. А., Дерюгин Ю. Н., Кириллов Г. А. и др. Сравнение результатов двумерных расчетов смесевых ГДЛ с данными эксперимента // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1983. Вып. 3 (4). С. 18–21.
6. Adamenkov A. A., Derjugin Yu. V., Vyskubenko B. A. et al. Oxygen-iodine laser research at RFNC-VNIIEF // Proc. SPIE. 1998. Vol. 3574. P. 326–331.
7. Vyskubenko B. A., Krukovsky I. M., Adamenkov A. A. et al. Investigation of the singlet oxygen generator with the twisted flow // Conf. on Lasers and Electro-Optics Europe (CLEO®/Europe). Edinburg, 14–18 September 1998.
8. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я. и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
9. Копчёнов В. И., Крайко А. Н. Монотонная разностная схема второго порядка для гиперболических систем с двумя независимыми переменными // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1983. Т. 23, № 4. С. 848–858.
10. Rosenwaks S., Rybalkin V., Katz A., Barmashenko B. Recent studies of Ben-Gurion University high efficiently supersonic chemical oxygen-iodine laser // Proc. SPIE. 2004. Vol. 5777. P. 87–95.

11. *Адаменков А. А., Бакшин В. В., Богачёв А. В. и др.* Стенд для изучения перспектив промышленного применения кислородно-йодного лазера // Квантовая электроника. 2007. Т. 37, № 7. С. 601—602.

Статья поступила в редакцию 02.04.12.

УДК 519.6:544.45

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОГРАММ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ ФИЗИКИ ГОРЕНИЯ

В. К. Рябинин
(Южно-Уральский ГУ, г. Челябинск)

Исследована эффективность применения трех программ — интеграторов систем обыкновенных дифференциальных уравнений с высокой степенью математической жесткости. Такие уравнения возникают при описании кинетики разветвленно-цепных реакций, свойственных для процессов горения и взрывного превращения. Тестирование программ-интеграторов выполнено на примере трех модельных задач, характерных для физики горения газов.

Ключевые слова: математическое моделирование, горение, химическая кинетика, жесткие дифференциальные уравнения, тестирование программного обеспечения.

Введение

Актуальной проблемой современной вычислительной физики является использование детальных кинетических механизмов химических процессов при решении задач макрокинетики процессов горения и химической газодинамики. При этом приходится описывать комплексы из сотен и даже тысяч (N_R) химических реакций с участием десятков-сотен (N_C) реагентов с включением в основную модель системы N_C обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики, обладающей высокой степенью математической жесткости [1, 2]. Выбор технологии решения системы жестких дифференциальных уравнений при решении различных классов задач может определяться совершенно разными требованиями.

В данной работе исследуется сравнительная эффективность ряда актуальных жестко устойчивых методов применительно к набору характерных тестовых задач. Сравнивались следующие программы:

GEAR — разновидность реализации *эталонного* алгоритма, основанного на многошаговом методе Гира переменного порядка, специально адаптированного для решения задач химической кинетики [2]. Имеет весьма эффективный блок адаптивного выбора шага. Позволяет использовать для вычисления

матрицы Якоби внешнюю пользовательскую процедуру, хотя имеет и встроенные средства для ее численного расчета. Опыт применения данной программы показал ее высокую эффективность и устойчивость при решении широкого круга задач теории горения. Недостатками являются сравнительно медленный рестарт при многократном запуске и необходимость вычисления матрицы Якоби.

СНЕМЕQ2 — сравнительно новая программа, специально ориентированная на применение в пространственных задачах вычислительной механики реагирующих сред [3, 4]. По данным авторов этого алгоритма, его быстродействие в несколько раз выше, чем у метода Гира. Данный метод основан на приближенном аналитическом решении уравнений химической кинетики. Хотя он имеет невысокий порядок точности, но при этом является одношаговым, быстро стартовым и не требует вычисления матрицы Якоби, что может дать существенный выигрыш в быстродействии и экономии памяти при решении задач пространственной химической газодинамики.

МЕТAN1 — полунявный метод экстраполяции [1, 5], занимающий промежуточное положение между предыдущими методами: он

одношаговый, но требует вычисления матрицы Якоби. Явным недостатком имеющейся в наличии версии этой программы является невозможность применения внешней пользовательской процедуры вычисления матрицы Якоби — используется только встроенный численный расчет.

Для решения всех задач, описанных ниже, использована система программирования Compaq Digital Visual FORTRAN v. 6.6. Все расчеты выполнены на трех типах процессоров — Pentium 3 1200 MHz, Pentium 4 3000 MHz и Core 2 Duo 2930 MHz, далее они обозначены как P3, P4 и C2D соответственно.

При программировании модулей для расчета правых частей уравнений химической кинетики и матрицы Якоби использована технология прямых безындексных вычислений, что приводит к увеличению размера исполняемых модулей, но существенно повышает скорость вычислений. Исходные тексты соответствующих модулей на Фортране генерируются автоматически с помощью специально разработанной программы.

При выполнении тестов на быстродействие подавляются все записи в файлы и обращения к монитору, т. е. контролируется только время выполнения собственно математических операций.

Тестовая задача 1. Нестационарный тепловой взрыв в адиабатическом реакторе

Расчет адиабатического периода индукции t_{ad} для реагирующих смесей произвольного состава при заданной начальной температуре является задачей, необходимой для оценки пожаро-взрывобезопасности веществ и технологических процессов. В частности, знание подобной зависимости t_{ad} необходимо для современных методов численного моделирования детонационных волн.

Моделируемая система представляет собой замкнутый изохорный адиабатический реактор — идеально теплоизолированную емкость постоянного объема, в начальном состоянии заполненную смесью газообразных веществ, способных вступать в систему суммарно-экзотермических реакций [6, 7]. Состав смеси, ее начальная температура и давление задаются. Из-за адиабатичности реактора выделяющееся в ходе реакций тепло приводит к прогрессирующему разогреву

смеси, заканчивающемуся тепловым взрывом через время t_{ad} . В ходе процесса меняются химический состав реагирующей смеси и ее температура. Для расчета текущих соотношений концентраций, парциальных плотностей и давлений используются формулы для смеси идеальных газов.

Математическая модель подобного реактора описывается уравнением баланса энергии для определения температуры T реагирующей смеси и N_C уравнениями для мольных концентраций C_j каждого из реагентов:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{N_C} \left(-h_j(T) \frac{dC_j}{dt} \right)}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)}; \quad (1)$$

$$\frac{dC_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_R} \nu_{i,j} W_i, \quad j = 1, \dots, N_C \quad (2)$$

при начальных условиях

$$t = 0; \quad T = T_n; \quad C_j = C_{j,0}.$$

В (1), (2) использованы следующие обозначения: t — время; h_j , c_{Vj} , μ_j — энтальпия, изохорная теплоемкость и молекулярная масса j -го компонента смеси; $\nu_{i,j}$ — стехиометрический коэффициент j -го реагента в i -й реакции. В уравнении (1) тепловые эффекты реакций рассчитываются с помощью закона Гесса, что позволяет выразить мгновенную скорость тепловыделения через текущие энтальпии реагентов. Скорость i -й реакции определяется законом действующих масс и модифицированным законом Аррениуса

$$W_i = \prod_{j=1}^{N_C} C_j^{\nu_{i,j}} k_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad (3)$$

где k_i , b_i , E_i — кинетические константы для расчета скорости i -й реакции; R — универсальная газовая постоянная.

Рассчитываются адиабатические периоды индукции для стехиометрической смеси $2\text{O}_2 + \text{CH}_4$ на основе кинетики [8] (156 реакций, 23 активных реагента и один инерт N_2). Решается система из 25 дифференциальных уравнений (24 концентрации + температура). Расчеты проводятся одним потоком последовательно для 19 начальных температур от 700 до 2500 К через 100 К при стехиометрическом соотношении метана и кислорода и начальном давлении 1 атм. Критерий

определения t_{ad} — достижение максимума скорости тепловыделения. Результаты расчетов приведены на рис. 1 и в табл. 1, где используются следующие обозначения: ε — относительная точность решения; it_{max} — максимальное количество итераций в программе CHEMEQ2; $N_{пр.ч}$, $N_{якоб}$ — количество вычислений правых частей уравнений и матрицы Якоби.

С математической точки зрения это достаточно несложная задача, поскольку в ходе расчета одного варианта температура только растет, а вычисления прекращаются задолго до завершения химических превращений. Однако при низких начальных температурах, когда период индукции велик и на большей его части изменения идут очень медленно и практически изотермически, подвергается испытанию алгоритм выбора шага, встроенный в программу. Возникает

конфликт между желанием увеличить шаг при расчете почти стационарного процесса и проявляющейся при этом математической жесткостью за счет быстрых химических реакций. Как показывает опыт, далеко не все программы успешно справляются с этой проблемой.

Все три программы дали практически идентичные зависимости адиабатического периода индукции, за исключением одной точки: при $T_n=1700$ К программа CHEMEQ2 дает завышенное значение; при изменении точности расчета и it_{max} этот результат сохраняется. Очевидно, аномальный результат является следствием особенности алгоритма выбора шага в программе CHEMEQ2. За исключением данной выпадающей точки, результаты расчетов, полученные по всем трем программам, согласуются с экспериментальными данными по задержке воспламенения метан-кислородных смесей [9, 10].

С точки зрения эффективности абсолютно лучший результат показала используемая версия метода Гира. Она успешно справилась со всеми расчетными режимами при минимальном объеме расчетов. Для программы CHEMEQ2 потребовался подбор параметра, определяющего ограничение на количество уточняющих итераций; в итоге в табл. 1 приведен наиболее быстрый вариант расчета. Самый худший результат продемонстрировала программа METAN1: на упомянутых выше низкотемпературных вариантах терялось решение. Для того чтобы его получить, в вызывающий модуль тестовой программы пришлось встроить довольно грубый ограничитель шага, что и привело к такому плохому результату.

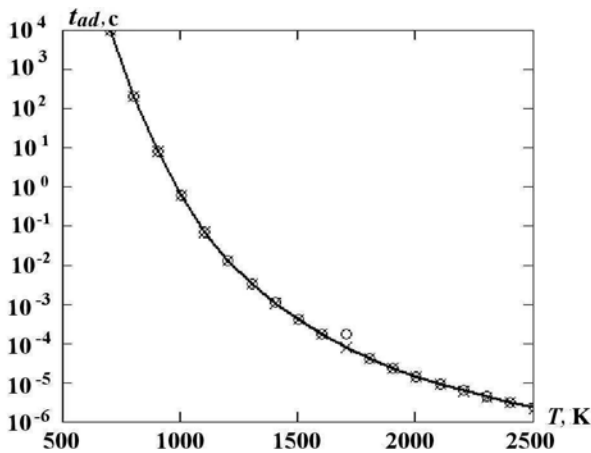


Рис. 1. Зависимость адиабатического периода индукции от начальной температуры: — — GEAR; ○ — CHEMEQ2; × — METAN1

Таблица 1

Результаты решения тестовой задачи 1

| Показатель | GEAR* ($\varepsilon = 10^{-4}$) | CHEMEQ2 ($\varepsilon = 10^{-2}$, $it_{max} = 5$) | METAN1** ($\varepsilon = 10^{-4}$) |
|-----------------------------|--------------------------------------|---|---|
| Время счета на P3/P4/C2D, с | 0,75/0,438/0,25 | 19,36/11,61/6,3 | 57,22/32,45/17,98 |
| $N_{пр.ч}/N_{якоб}$ | 13 199/1 052 | 389 717 | 1 084 519 |

*Расчет матрицы Якоби увеличивает время счета задачи примерно в 3,1 раза.

** $N_{якоб}$ не контролировалось, так как численный расчет выполняется только внутри программы-решателя.

Тестовая задача 2. Осцилляционное горение водород-кислородной смеси в проточном реакторе идеального смешения [11]

Схема проточного реактора идеального смешения показана на рис. 2. По сравнению с моделью из задачи 1 здесь добавляются теплообмен через стенку с окружающей средой, имеющей температуру T_0 , и объемный поток реагентов w , поступающих на вход с температурой T_{in} и заданными мольными концентрациями, $C_{j,in}$ [6, 7]. На выходе из реактора этот поток имеет температуру T и состав реагирующей смеси с C_j . Идеальное смешение обеспечивает отсутствие градиентов температуры и концентрации в объеме реактора.

Уравнения из задачи 1 дополняются слагаемыми для тепло- и массообмена с окружающей средой:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{N_C} -h_j(T) \frac{dC_j}{dt}}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)} - \frac{T - T_0}{t_q} - \frac{T - T_{in}}{t_{\pi}}; \quad (4)$$

$$\frac{dC_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_R} \nu_{i,j} W_i + \frac{C_{j,in} - C_j}{t_{\pi}}, \quad j = 1, \dots, N_C. \quad (5)$$

Интенсивности тепло- и массообмена задаются в виде характерных времен t_q и t_{π} теплообмена и пребывания вещества в реакторе (t_{π} есть отношение объема реактора к потоку реагентов w); считаем, что они не меняются в ходе процесса. Соотношения (4), (5) дополняются соотношением (3) для скорости реакций и такими же начальными условиями, как в задаче 1.

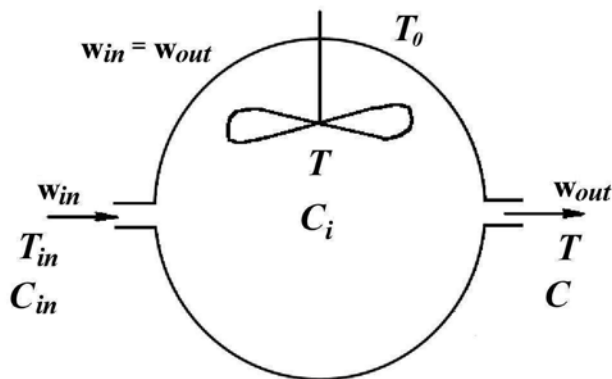


Рис. 2. Схема реактора идеального смешения

Рассчитывается поведение реактора идеально-го смешения для стехиометрической смеси $2H_2 + O_2$ на основе кинетики [12] (44 реакции, 8 активных реагентов и один инерт N_2). Решается система из 10 дифференциальных уравнений. Расчеты проводятся для случая линейного роста температуры окружающей среды по формуле $T_0 = (700 + 5t) K$; $t_q = 0,04 c$; $t_{\pi} = 4 c$. На вход реактора подается стехиометрическая смесь водорода и кислорода при температуре $T_{in} = 700 K$. При таких параметрах в реакторе наблюдается переход от режима без горения к устойчивому горению через сложную последовательность релаксационных автоколебаний с убывающими амплитудой и периодом (рис. 3) [11].

Расчет такого процесса представляет сложность для любого интегратора, так как последовательность вспышек с полным выгоранием исходных веществ и последующих периодов депрессии при обновлении реагирующей смеси приводит к многократной перестройке структуры спектра матрицы Якоби и изменению характера жесткости решаемой задачи. Это требует наличия "сильного" алгоритма адаптивного выбора шага и высокой точности расчета.

Результаты применения тестируемых программ обобщены в табл. 2.

И здесь наилучшие результаты показал метод Гира. Его адаптивные свойства позволили по-

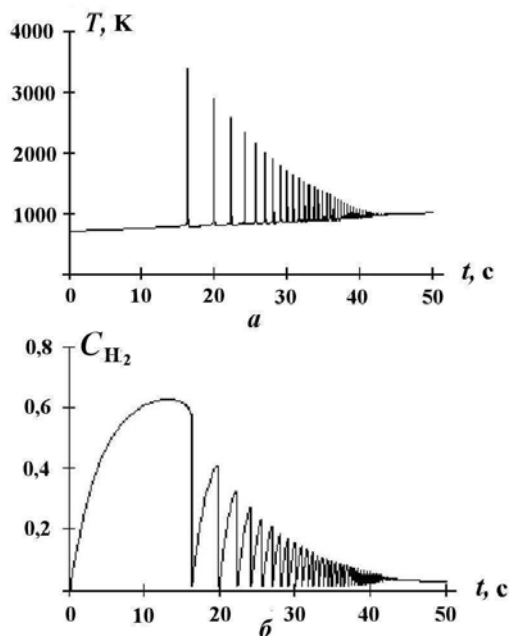


Рис. 3. Релаксационные колебания в реакторе: а — температура; б — мольная доля H_2

Результаты решения тестовой задачи 2

| Показатель | GEAR ($\varepsilon = 10^{-4}$) | СНЕМЕQ2 ($\varepsilon = 10^{-4}, it_{\max} = 1$) | МЕТАН1* ($\varepsilon = 10^{-4}$) |
|-----------------------------------|-------------------------------------|---|--|
| Время счета на P3/P4/C2D, с | 0,593/0,312/0,172 | 158,6/91,1/51 | 3,34/2,73/1,05 |
| $N_{\text{пр.ч}}/N_{\text{якоб}}$ | 33 674/5 144 | 11 271 140 | 214 444 |

* $N_{\text{якоб}}$ не контролировалось, так как численный расчет выполнялся только внутри программы-решателя.

лучить решение за минимальное время и с минимальным количеством вычислений правых частей и матрицы Якоби. Интегратор МЕТАН1 позволил получить практически такое же решение с несколько большими затратами. Однако следует отметить, что при его использовании изменение параметров расчета (заданной точности, начального шага по времени) может вообще привести к потере решения, в то время как метод Гира с такими ситуациями успешно справляется. Применение интегратора СНЕМЕQ2 при указанных параметрах дало похожее решение (с отклонениями в несколько процентов в послевзрывных областях), очень сильно проигрывая в эффективности. При снижении точности СНЕМЕQ2 дает качественно совершенно непохожие результаты. Это, по всей видимости, объясняется его изначально низким порядком точности, не позволяющим отслеживать сложный характер моделируемого процесса.

Тестовая задача 3. Макрокинетическая модель дефлаграционной волны горения

Как отмечено в [1], моделирование сложных химических процессов как составляющей пространственных задач физики горения и химической газодинамики сильно отличается от раздельного решения системы уравнений химической кинетики. В этих задачах уравнения химической кинетики должны быть проинтегрированы на относительно малых шагах по времени и во многих расчетных ячейках совместно с расчетом диффузионных и конвективных членов в уравнениях. Кроме того, требуемое большое число расчетных ячеек, достигающее в многомерной области десятков или сотен тысяч, не позволяет хранить дополнительную информацию обо всех компонентах в каждой ячейке между шагами по времени. Следует учесть и то, что ошибки при расчете газовой динамики редко оказываются меньше нескольких процентов, так

что при расчете химических процессов не нужна высокая точность. Константы скоростей химических реакций, в лучшем случае, известны неточно. Именно поэтому при решении задач химической газодинамики целесообразно применять одношаговые самостартующие алгоритмы, использующие вычислительные методы низкого порядка. Этим требованиям отвечает программа СНЕМЕQ2 [3, 4].

Для проверки применимости интеграторов в условиях пространственных расчетов была выбрана модель распространения одномерного дефлаграционного пламени, основанная на макрокинетическом подходе [6, 7]. В этом случае слабые, описывающие процессы переноса, задаются наиболее формальным образом, позволяя при этом сохранить химическую часть задачи в полном виде.

Как известно, основным механизмом распространения волны дефлаграционного горения является молекулярный перенос тепла из зоны горения в непрореагировавшее вещество. В газах параллельно возможна и молекулярная диффузия химически активных реагентов. В использованной модели диффузия для простоты не учитывается. Кроме того, не учтена и сжимаемость газа. Модели подобного типа применяются для моделирования твердопламенного горения [13], где диффузия и сжимаемость не существенны. Тем не менее данная модель была применена для описания в качестве модельной задачи газофазного пламени, поскольку Я. Б. Зельдовичем и Д. А. Франк-Каменецким [6, 7] были получены базовые результаты по скорости горения газовых смесей с использованием только уравнения теплопроводности. Для тестовой задачи, в которой достаточно сохранить только доминирующие физические механизмы, получение количественно точных результатов — не главная цель. Учет диффузии и теплового расширения газа носит поправочный характер, и такое упрощение модели вполне допустимо. В

частности, можно отметить, что тепловое расширение газа в зоне прогрева увеличивает длину волны $\delta_{\text{тепл}}$ (рис. 4), градиент температуры уменьшается, снижая тепловой поток из узкой зоны химической реакции, что в соответствии с теорией Зельдовича—Франк-Каменецкого должно приводить к уменьшению нормальной скорости горения. Поэтому предлагаемая модель должна демонстрировать завышенную скорость распространения фронта пламени по сравнению с наблюдаемой в эксперименте.

С учетом принятых допущений уравнение баланса энергии (1) должно быть дополнено слагаемым, описывающим молекулярную теплопередачу, т. е.

$$\frac{dT}{dt} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\sum_{j=1}^{N_C} -h_j(T) \frac{dC_j}{dt}}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)}$$

Уравнения для концентраций реагентов аналогичны (2).

Начальные условия: $t = 0; T(x) = T_n; C_j(0) = C_{j,0}$.

Граничные условия:

$$\begin{aligned} T(0, t) &= T_{ign} \text{ при } 0 \leq t \leq t_{ign}; \\ \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} &= 0 \text{ при } t > t_{ign}; \\ \frac{\partial T(L, t)}{\partial x} &= 0 \text{ при } t > 0. \end{aligned}$$

Здесь a — коэффициент температуропроводности; L — длина расчетной области; T_{ign} и t_{ign} — температура и длительность зажигающего импульса.

Рассчитывается процесс распространения дефлаграционной волны горения в близкой к сте-

хиометрической метан-воздушной смеси $2O_2 + CH_4 + 7N_2$ на основе кинетики [8] (156 реакций, 23 активных реагента и один инерт N_2). Решается система из 25 дифференциальных уравнений. Исходная смесь с температурой 300 К при давлении 1 атм поджигается слева накаливаемым телом с температурой 2500 К в течение 0,0005 с. Образуемый фронт пламени движется вправо до столкновения с противоположной адиабатической границей.

Основная пространственная задача решается с помощью полунейвной схемы методом прогонки. Для расчета химических процессов использован принцип расщепления по процессам [1]. Химические реакции рассчитываются в автономном программном блоке, вызываемом при расчете каждой ячейки. Длина расчетной области $L = 10^{-3}$ м, длительность рассчитываемого процесса 0,002 с. Параметры сетки определяются исходя из оценок характерной ширины зоны прогрева $\sqrt{at_{ad}}$ и характерного времени реакции t_{ad} . Расчет выполняется на 500 пространственных узлах, расположенных на равномерной сетке, за 2500 временных шагов одинаковой длины.

На рис. 5 показаны рассчитанные профили температуры в разные моменты времени, что демонстрирует структуру волны горения. На рис. 6 приведены зависимости координаты фронта пламени и его скорости при оптимальных для программ параметрах точности.

Видно, что все три программы демонстрируют близкие (но не идентичные) результаты. Наблюдаются небольшие колебания скорости горения. Отметим, что при этом для программы GEAR потребовалось задать довольно высокую точность $\varepsilon = 10^{-6}$. При уменьшении заданной точности расчета до $\varepsilon = 10^{-4}$ решение методом Гира начинает отклоняться от решений по CHEMEQ2 и METAN1 (рис. 7) — наблюдается более высокая скорость фронта пламени, а колебания скорости почти исчезают. При дальнейшем уменьшении точности решения еще сильнее расходятся.

Несмотря на принятые допущения при формулировке задачи, рассчитанная температура продуктов горения $T = 2190$ К согласуется с экспериментальными данными (2180—2240 К) [14]. Скорость же фронта пламени 0,45—0,5 м/с, как и предполагалось, оказалась несколько выше экспериментально определенной нормальной скорости горения (0,28—0,4 м/с) [10, 14, 15].

В табл. 3 обобщены результаты, позволяющие получить представление об эффективности те-

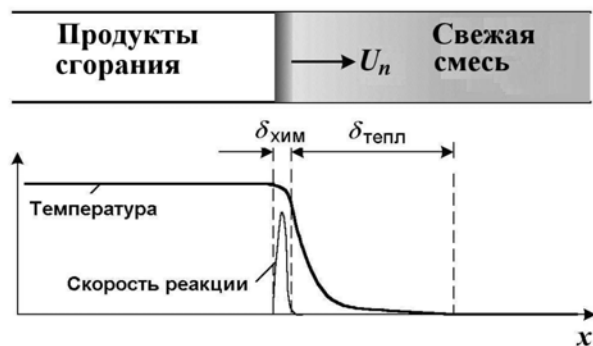


Рис. 4. Структура волны дефлаграционного горения

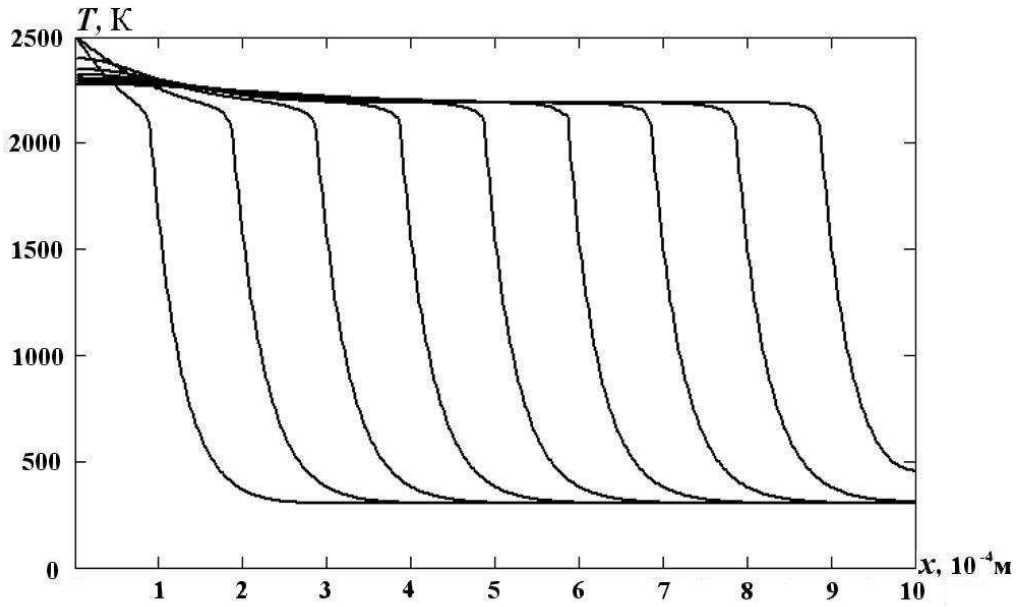


Рис. 5. Профили температуры в волне горения в разные моменты времени

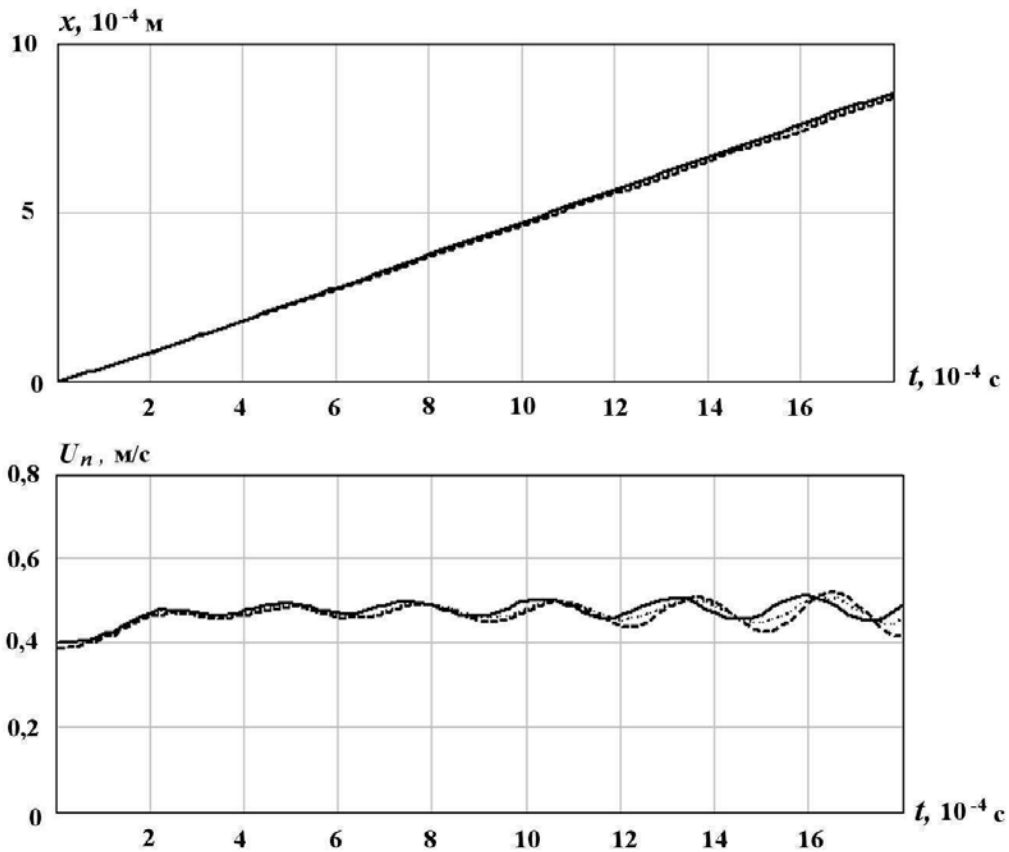


Рис. 6. Зависимости координаты фронта пламени и его скорости при оптимальных для программ параметрах точности: — — GEAR, $\varepsilon = 10^{-6}$; ... — CHEMEQ2, $\varepsilon = 10^{-2}$; - - - — METAN1, $\varepsilon = 10^{-4}$

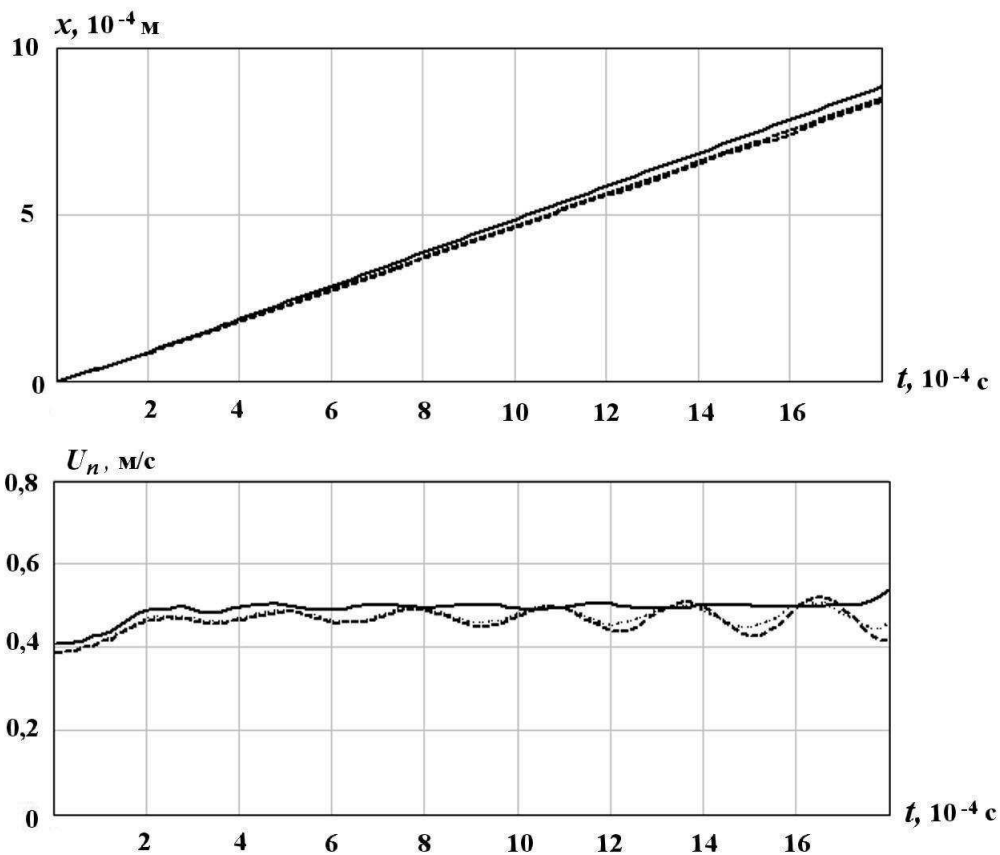


Рис. 7. Зависимости координаты фронта пламени и его скорости при пониженной точности для программы GEAR: — — GEAR, $\varepsilon = 10^{-4}$; ... — CHEMEO2, $\varepsilon = 10^{-2}$; - - - - METAN1, $\varepsilon = 10^{-4}$

Таблица 3

Результаты решения тестовой задачи 3

| Показатель | GEAR* ($\varepsilon = 10^{-6}$) | CHEMEO2 ($\varepsilon = 10^{-2}$, $it_{\max} = 1$) | METAN1** ($\varepsilon = 10^{-4}$) |
|---|--------------------------------------|--|---|
| Время счета на P3/P4/C2D | 1 614/1 050/605 | 737,5/416,4/234,6 | 3 490/2 022/1 124 |
| $N_{\text{пр.ч.}}/N_{\text{якоб}}$ | 24 665 703/4 744 623 | 14 656 582 | 65 818 06 |
| Среднее время одного обращения к хим. блоку, мс | 1,29/0,84/0,485 | 0,59/0,333/0,188 | 2,79/1,62/0,899 |

* Расчет якобиана увеличивает время счета задачи примерно в 3,7 раза; снижение точности до $\varepsilon = 10^{-4}$ уменьшает время счета в 1,85 раза.

** $N_{\text{якоб}}$ не контролировалось, так как численный расчет выполнялся только внутри программы-решателя.

стируемых программ. Здесь наилучшим образом проявил себя интегратор CHEMEO2. Он позволил получить решение за минимальное время при заданной точности $\varepsilon = 10^{-2}$. Программа, основанная на методе Гира, в данном случае показала вдвое худшие результаты. Отметим, что при снижении точности расчета до $\varepsilon = 10^{-4}$ эффективности GEAR и CHEMEO2 становятся сопоставимыми, хотя при этом, как отмечено вы-

ше, появляются качественные отличия в решении данной задачи. Если учесть, что интегратор CHEMEO2 не требует модуля вычисления матрицы Якоби, что весьма облегчает процесс разработки программ, выгоды его применения становятся очевидными. Программа METAN1 и здесь оказалась на последнем месте, хотя и не с таким отрывом, как в предыдущих задачах.

В заключение отметим, что решение этой же задачи с одной эффективной реакцией без применения внешнего интегратора было получено на P3 менее чем за одну секунду. При этом полученные температура продуктов горения и скорость фронта были близки к приведенным выше значениям, но профиль температуры в фронте пламени был более крутым, а колебания скорости пламени отсутствовали.

Выводы

Программа, основанная на методе Гира, хорошо себя зарекомендовала при решении всех задач. Для задач неизотермической химической кинетики она лидирует с огромным отрывом, но при решении пространственной задачи несколько проигрывает CHEMEQ2.

Программа CHEMEQ2 неэффективна при решении задач неизотермической химической кинетики. Напротив, при решении пространственной задачи ее использование дало лучшие результаты.

По программе METAN1 везде получены посредственные результаты, при этом она очень "капризна" и неустойчива. При решении каждой задачи потребовалось приложить заметные усилия по подбору параметров программы, при которых не теряется решение.

Во всех случаях изменение типа процессора не отразилось на параметрах расчета — количества расчетов правых частей уравнений и матрицы Якоби остались одними и теми же, как и численные результаты. Изменилось лишь время расчета, определяемое быстродействием процессора, причем соотношение времен счета для всех задач оказалось одинаковым.

Работа выполнена при поддержке программы развития Южно-Уральского государственного университета (Национальный исследовательский университет).

Список литературы

1. *Оран Э., Борис Дж.* Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990.
2. *Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левицкий А. А.* Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука, 1984.

3. *Oran E., Boris J.* Numerical Simulation of Reactive Flow. Second ed. Cambridge University Press, 2001.
4. *Mott D. R., Oran E. S.* CHEMEQ2: A Solver for the Stiff Ordinary Differential Equations of Chemical Kinetics. NRL Memorandum Report No. 6400-01-8553, 2001.
5. *Deufhard P.* A semi-implicit midpoint rule for stiff systems of ordinary differential equations // Num. Math. 1983. Vol. 41. P. 373—398.
6. *Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович Б. Б., Махвиладзе Г. М.* Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
7. *Франк-Каменецкий Д. А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
8. *Вестбрук Ч., Уртъев П.* Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации // ФГВ. 1983. Т. 19. Вып. 6. С. 65—76.
9. *Борисов А. А., Драгалова Е. В., Заманский В. М. и др.* Механизм и кинетика самовоспламенения метана // Химическая физика. 1982. № 4. С. 536—543.
10. *Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р.* Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: Физматлит, 2006.
11. *Виллюнов В. Н., Рябинин В. К.* О моделировании колебательных режимов горения водорода и метана в проточном реакторе с перемешиванием // ФГВ. 1989. Т. 25. Вып. 1. С. 16—26.
12. *Бабушок В. И., Крахтинова Т. В., Бабкин В. С.* Структура предела цепочно-теплового самовоспламенения // Кинетика и катализ. 1984. Т. 25. Вып. 1. С. 5—12.
13. *Мержанов А. Г.* Твердопламенное горение. Черноголовка: ИСМАН, 2000.
14. *Мальцев В. М., Мальцев М. И., Кашпоров Л. Я.* Основные характеристики горения. М.: Химия, 1977.
15. *Иссерлин А. С.* Основы сжигания газового топлива. Л.: Недра, 1987.

Статья поступила в редакцию 15.03.12.

УДК 539.17

СИСТЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ И ПОДГОТОВКИ АКТИВАЦИОННЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ

А. А. Андрианов, Ю. А. Коровин, И. С. Купцов, А. А. Наталенко
(Институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ, г. Обнинск)

Дается описание разработанных авторами интегрированных программных систем IViS SMPI и InIS HAND, предназначенных для повышения эффективности фундаментальных и прикладных исследований в области константного обеспечения расчетов перспективных ядерно-энергетических установок. Описывается алгоритм получения оцененных ядерно-физических данных с использованием разработанного программного обеспечения, основанный на современных методах теории принятия решений при многих критериях.

Ключевые слова: модели высокоэнергетических ядерных реакций, программные комплексы, интерактивные среды, методы многокритериальной теории принятия решений, факторный анализ, оцененные ядерно-физические данные.

Введение

В последнее десятилетие возрос интерес к ядерным реакциям при высоких энергиях, что обусловлено как научными проблемами, так и многочисленными приложениями: создание высокоэнергетических нейтронных источников, производство медицинских радиоизотопов, радиационная защита космических аппаратов и ускорителей [1, 2] и др.

Решение указанных задач требует большого количества ядерных данных для широкого спектра нуклидов и энергий, достигающих нескольких десятков гигаэлектронвольт. Получить все данные экспериментально невозможно, поэтому необходимо развитие аналитических методов, точность которых должна проверяться по измерениям, проводимым в определенных условиях.

В настоящее время растет количество моделей и программ, предназначенных для моделирования ядерных реакций в различных диапазонах энергии и массовых чисел, а также критериев и алгоритмов проверки адекватности моделей ядерных реакций данным натурального эксперимента. Однако следует отметить, что до сих пор нет общепринятых теоретических представлений и моделей, которые бы удовлетворительно

объясняли весь спектр рассматриваемых ядерных реакций.

Современные модели и программные средства расчета высокоэнергетических ядерных реакций

В настоящее время такие организации, как МАГАТЭ, Национальный институт ядерной физики и техники (Франция), Лос-Аламосская национальная лаборатория (США), Ядерный исследовательский центр "Нахаль Сорек" (Израиль), и ряд других организаций и исследовательских лабораторий проявляют активный интерес к программным кодам расчета выходов продуктов глубокого расщепления (табл. 1). Эти программы основаны либо на методе Монте-Карло, либо на подходе квантово-молекулярной динамики.

В 2008 г. эксперты по физике высоких энергий в рамках проекта МАГАТЭ по верификации моделей реакций глубокого расщепления [1] пришли к выводу, что существующие модели реакций необходимо верифицировать на современных экспериментальных данных для определения точности и надежности получаемых с их по-

Характеристики наиболее распространенных современных транспортных кодов

| Характеристика | MCNPX-2.6, LANL | PHITS-2.09, RIST, GSI | FLUKA-2006.3, CERN, INFN | GEANT4-4.9.1, CERN, INFN, KEK, SLAC | MARS-15 FNAL |
|---|--|--|---|---|---------------------------|
| Язык программирования | Fortran 90/C | Fortran 77 | Fortran 77 | C++ | Fortran 90/C |
| Возможность параллельных вычислений | Возможно | Возможно | Возможно | Возможно | Возможно |
| Модели высокоэнергетических ядерных реакций | ABLA, Bertini, ISABEL, CEM, LAQGSM, FLUKA89 | GEM, JAM, JQMD > 3 GeV | PEANUT, DPMJET, GLAUBER, neutrinos | ABLA, Bertini, INCL, GEM | CEM, LAQGSM, DPMJET |
| Веб-сайты с описанием | mcnpx.lanl.org | rcww.kek.jp/ research/shield/ phits.html | fluka.org | geant4.web. cern.ch/geant4 | www-ap.fnal.gov/ MARS/ |

мощью данных в различных массовых и энергетических диапазонах.

Компьютерное моделирование является единственным способом, посредством которого можно понять механизм взаимодействия нуклонов в области высоких энергий, чему всецело способствует повышение производительности вычислительной техники. Получившие в последнее время широкое распространение *параллельные* вычисления дают большие преимущества, позволяя моделировать огромное число событий за короткий период времени.

При возможности протекания реакции глубокого расщепления по различным каналам дифференциальное сечение при высоких энергиях рассчитывается как функция энергии и направления вторичной частицы типа j , образующейся, когда адрон типа h_i с энергией E_i взаимодействует с ядром-мишенью A_{targ} :

$$\frac{d\sigma}{dE d\Omega} = (E_j, \Omega, h_i, E_i, A_{targ}).$$

Всю необходимую информацию для адекватного экспериментальным данным построения модели реакции невозможно получить из эксперимента. В частности, для оценки потенциала мишени как источника нейтронов реакции скалывания понадобятся энергии и угловые распределения пяти типов частиц (p, n, π^\pm, π_0), испускаемых этой мишенью, образованных четырьмя налетающими частицами (p, n, π^\pm) при энергиях от 20 МэВ до 3 ГэВ; для предсказания распределения массы и заряда вылетающих ядер при различных значениях энергии налетающих частиц

понадобится дополнительно сечение кумулятивного выхода легких ядер (D, T, ^4He и т. д.).

В настоящее время существуют объективные трудности детального описания данной области энергий и, как следствие, получил широкое распространение подход, основанный на предварительной разработке моделей с наличием совокупности свободных параметров, которые впоследствии подбираются для конкретной реакции на основе количественного сопоставления с экспериментом. Модели, прошедшие валидацию, включаются в комплексы программ расчета переноса излучений, позволяющие, в конечном счете, рассчитать последствия взаимодействия облученных частиц с веществом.

Усовершенствованные транспортные коды для изучения взаимодействия излучения с веществом и все генераторы взаимодействия частиц с ядрами с указанием их особенностей приведены в табл. 1 и 2 соответственно [2–5].

Широкое распространение получила модель внутриядерного каскада, основанная на методе Монте-Карло, соединенная с испарительной моделью снятия возбуждения. Эта модель используется для расчета выходов и характеристик всех частиц, образующихся в реакциях глубокого расщепления. Иногда между двумя стадиями включают предравновесную стадию эмиссии частиц.

Описания процессов нуклон-нуклонных взаимодействий, модели ядра мишени и траекторий нуклонов практически одинаковые во всех программах. Значительные расхождения обнаруживаются в критериях выхода из стадии внутриядерного каскада, в модельных описани-

Генераторы событий взаимодействия частиц с ядрами

| Внутриядерный каскад (< 3 ГэВ) | Квантово-молекулярная динамика | Испарение/деление | Внутриядерный каскад/испарение |
|--------------------------------|--------------------------------|--|--------------------------------|
| Bertini, CEM, INCL, ISABEL | JQMD, QMD-SDM, BUU, SMM | ABLA, ALICE/ASH, EVAP-versions, GEM, GEMINI, JULIAN, PACE, ORNL-fission, RAL-fission | BRIC, DISCA, MICRES |

ях предравновесной стадии, процесса испускания кластеров и образования пионов.

В настоящее время активно ведутся работы по стандартизации кодов и входящих в них параметров. Обсуждаются две возможности решения этой проблемы. Первое решение состоит в подборе параметров и программных модулей для получения требуемых данных. Второе направление базируется на унификации и согласовании фундаментальных параметров. При этом существует вероятность того, что расчеты, выполненные с таким набором параметров, в конечном счете, могут хуже согласовываться с экспериментом.

Энергетический диапазон, в котором применим данный набор моделей, достаточно широк: от нескольких десятков мегаэлектронвольт до нескольких гигаэлектронвольт. В некоторых программах, например в каскадной модели INCL4, соединенной с испарительной моделью ABLA [6], предравновесная стадия отсутствует. Расчеты по программам INCL4/ABLA, CEM03 и LAQGSM [7] дают хорошее согласие с экспериментальными данными в широком диапазоне энергий налетающих частиц и массовых чисел ядер-мишеней. Однако ни одна из существующих моделей не способна воспроизвести экспериментальные данные во всей энергетической области и для всех ядер-мишеней.

Среди всего набора каскадных моделей особое место занимает модель, разработанная в Дубне в конце 60-х годов прошлого века [8]. Развитие внутриядерного каскада в данном случае моделируется во времени. В течение последних двадцати лет эта модель развивалась в Обнинском институте атомной энергетики, и на ее основе был создан комплекс программ CASCADE/INPE [9] (впоследствии получивший название CASCADE/ASF) для расчета переноса частиц.

В последнее время эта модель была объединена со статистической моделью, описываю-

щей равновесную эмиссию частиц. Новая программа, получившая название CASCADeX 1.2 (CASCADE eXtended), предназначена для моделирования взаимодействий с веществом налетающих частиц и ядер с массовым числом до 240 а.е. Массовые числа ядер-мишеней (*A*) варьируются в диапазоне от 2 до 240 а.е. Энергии налетающих частиц составляют до 2 ГэВ/нуклон для ядер-мишеней с массой меньше 40 а.е. и до 1 ГэВ/нуклон для ядер тяжелее 40 а.е.

Избежать несовершенства каждого расчетного кода можно путем комбинирования отдельных моделей в одном программном комплексе и дополнив его алгоритмами проверки адекватности моделей ядерных реакций на основе данных натурального эксперимента. Эта схема последовательно развивается и используется в данной работе.

Системы подготовки высокоэнергетических ядерных данных

Для повышения эффективности научных исследований в области константного обеспечения расчетов перспективных ядерно-энергетических установок разрабатываются два типа программных систем на базе современных моделей ядерных реакций при высоких энергиях. Их цель — обеспечить возможность получения более точных и полных моделей в данной предметной области на основе количественного сопоставления с экспериментом и снижения трудоемкости научных исследований [10, 11].

Первая категория разрабатываемых программных систем — это так называемые интерактивные графические системы IViS (Interactive Visual Systems). Их целесообразность продиктована тем, что модели высокоэнергетических ядерных реакций являются многопараметрическими, в связи с чем возникает задача по выбору наилучших свободных параметров моде-

ли. Эту задачу и решают данные системы, в которых реализованы современные методы многокритериальной теории принятия решений. В настоящий момент разработана интерактивная графическая система для идентификации параметров моделей реакций глубокого расщепления IViS SMPI (Interactive Visual Systems — Spallation Models Parameters Identificator).

Вторая категория разработок — справочно-информационные интерактивные комплексы InIS (Information Interactive System) — связана с необходимостью интеграции существующих моделей ядерных реакций с целью создания комплексной среды по кросс-верификации и валидации различных моделей и формированию по результатам этой работы оцененных библиотек ядерно-физических данных (ЯФД). К настоящему времени создан комплекс InIS HAND (High Energy Activation Nuclear Data), обеспечивающий автоматизацию подготовки активационных ЯФД в высокоэнергетической области.

Разработанные программные системы взаимодополнительны (рис. 1). Так, оптимальные значения параметров различных моделей высокоэнергетических ядерных реакций, найденные в результате работы системы IViS SMPI, могут быть переданы в систему InIS HAND для кросс-верификации различных моделей с выбранными параметрами.

Остановимся подробнее на методике расчетных исследований с использованием разработанного инструментария.

Система IViS SMPI включает в себя расчетный код физической модели, формы входных и выходных данных, подлежащие заполнению, оптимизационный модуль и модуль обработки результатов расчетов. Также имеется доступ к готовым библиотекам ЯФД, к экспериментальным данным и результатам расчетов по другим моделям, хранящимся в XML-формате.

Основная функция системы IViS SMPI — это выбор параметров модели, обеспечивающих наилучшее согласие с экспериментом (рис. 2). Первым шагом является выбор типа расчета в соответствии с имеющимися экспериментальными данными: массовые распределения, функции возбуждения, дважды дифференциальные сечения. После этого необходимо указать диапазон варьируемых параметров, набор критериев и параметры случайного поиска. Для проведения процедуры оценки необходимо указать *референтные* данные, на основании которых будут вычисляться *факторы согласия*. Референтными данными могут быть результаты ранее сделанных расчетов, экспериментальные данные или данные, взятые из библиотеки ЯФД. Если число критериев более двух, то после расчета происходит автоматический отбор эффективных наборов параметров модели. Окончательный выбор оптимального набора параметров осуществляется с использованием методов теории принятия решений при многих критериях.

В данный момент для окончательного выбора наилучшего набора параметров модели из сово-

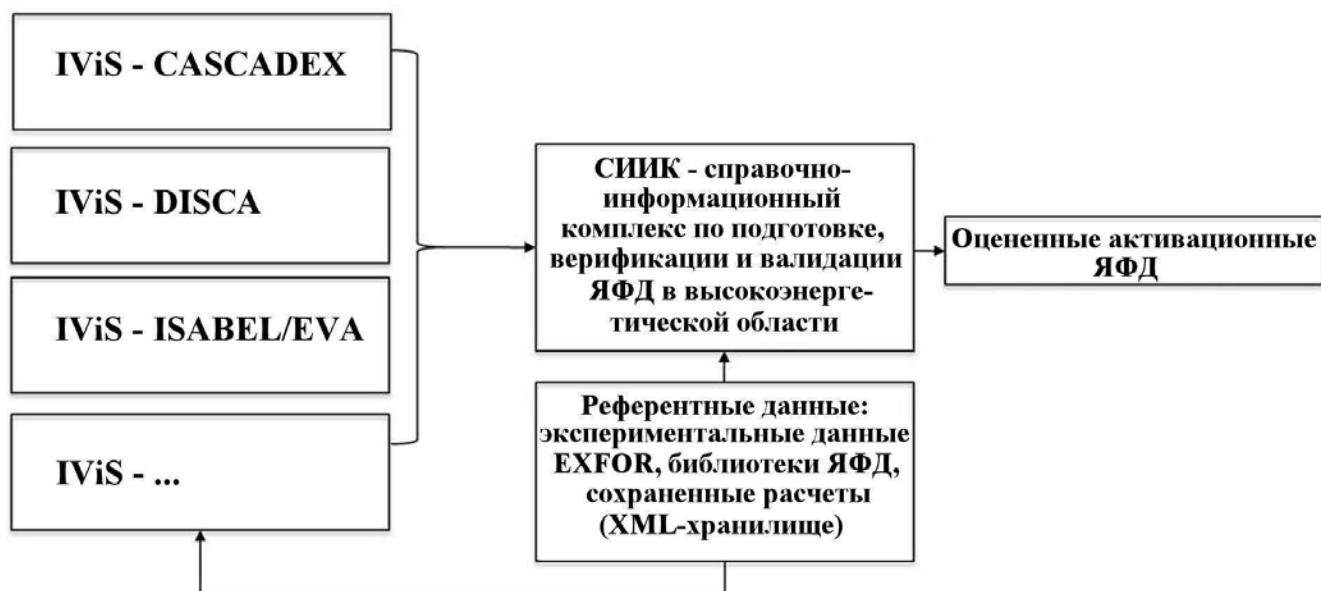


Рис. 1. Связь систем IViS SMPI и InIS HAND

купности недоминируемых реализован метод анализа иерархий в аддитивной и мультипликативной формах. Для использования данного метода пользователю необходимо провести попарное сравнение критериев отбора. Конечным результатом выполнения программы являются наиболее подходящие относительно выбранных референтных данных и предпочтений пользователя параметры модели. В настоящий момент авторы расширяют функциональные возможности программных систем за счет включения в них иных методов дискретного анализа решений (MAVT, TOPSIS, PROMETHEE, MAUT). Для подбора параметров модели был предложен и реализован метод глобальной оптимизации, основанный на использовании так называемых равномерно распределенных последовательностей точек.

Система InIS HAND позволяет пользователю, не имеющему специальной квалификации, подготовить активационные ЯФД, статистически их оценить на имеющихся экспериментах, верифи-

цировать модели и графически представить результаты. Схема функционирования системы представлена на рис. 3.

Алгоритм выбора наилучшей модели в системе InIS HAND сходен с алгоритмом выбора наилучших параметров в IViS-системе. Главное отличие состоит в том, что сравниваются расчеты по различным моделям, в которых, в частности, могут быть заданы оптимальные параметры по каждой модели, определенные в результате функционирования систем IViS. В InIS HAND отсутствует блок, предназначенный для поиска оптимальных параметров моделей, однако в системе реализован большой набор сервисных функций, обеспечивающий пользователю комфортную работу с различными моделями (визуализация, запись в формате ENDF, обработчик библиотек оцененных и экспериментальных ядерных данных, *сшивка* расчетов и др.).

Данная программная система состоит из двух структурных элементов: проекты и решения (рис. 4). Проекты представляют собой базовый элемент системы, содержащий необходимую для анализа расчетную и экспериментальную ин-



Рис. 2. Схема функционирования системы IViS SMPI

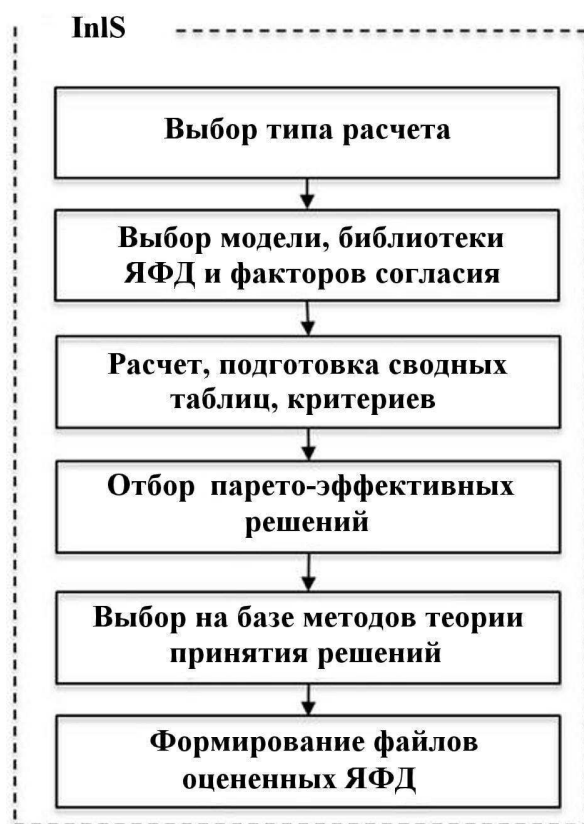


Рис. 3. Схема функционирования системы InIS HAND

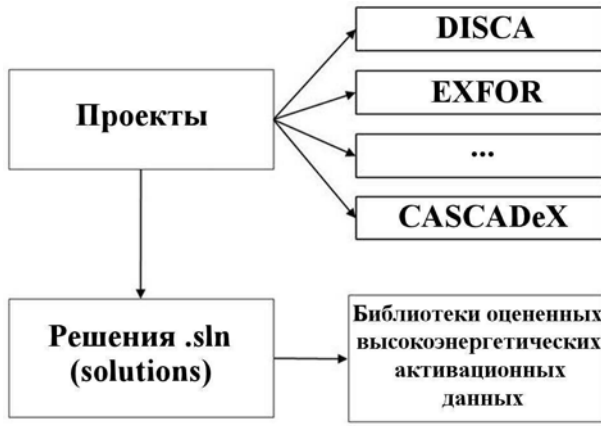


Рис. 4. Структура данных InIS HAND

формацию. Каждое решение объединяет несколько проектов и предоставляет весь спектр сервисных функций, необходимых для работы по формированию оцененных файлов активационных ядерных данных.

Одна из проблем в данной области связана с отсутствием экспериментальных данных как в определенном энергетическом диапазоне, так и диапазоне массовых чисел. Для компенсации отмеченного недостатка был предложен алгоритм выбора модели в области, в которой отсутствует необходимая экспериментальная информация (рис. 5).

В описанных программных системах для оценки согласования расчетов с референтными данными используются как факторы согласия, широко используемые в настоящее время в данной предметной области, так и ряд факторов, предложенных авторами, отражающих их представления о возможных способах оценки расчетов. Вся совокупность факторов представлена

в табл. 3. Единовременное рассмотрение столь широкого набора факторов согласия продиктовано тем, что в настоящий момент в данной предметной области отсутствует общепринятая и согласованная методология сравнения с экспериментом.

Для создания систем InIS HAND и IViS SMPI были выбраны Microsoft.NET в качестве основной платформы и основной язык разработки приложений для нее C# [12]. Выбор технологии .NET обусловлен как возможностью эффективно разрабатывать приложения под Windows, web-приложения и web-сервисы, так и тем, что в .NET встроена поддержка "взаимодействия языков". Созданные ранее библиотеки для численных расчетов или код, написанный на другом языке программирования, можно интегрировать непосредственно в приложения на C#. Это позволяет одновременно писать коды на нескольких языках, а затем интегрировать их или использовать совместно, что в особенности полезно при разработке рассматриваемых программных систем.

Некоторые приложения разработанного программного обеспечения

Разработанное программное обеспечение было использовано для проведения расчетов в рамках проекта, организованного МАГАТЭ, по сравнительному анализу моделей реакций глубокого расщепления ("Benchmark of Spallation Models"), а также обновлению библиотек активационных данных [1].

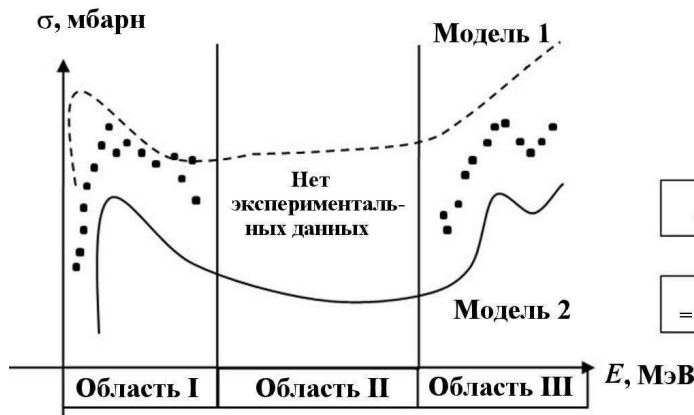
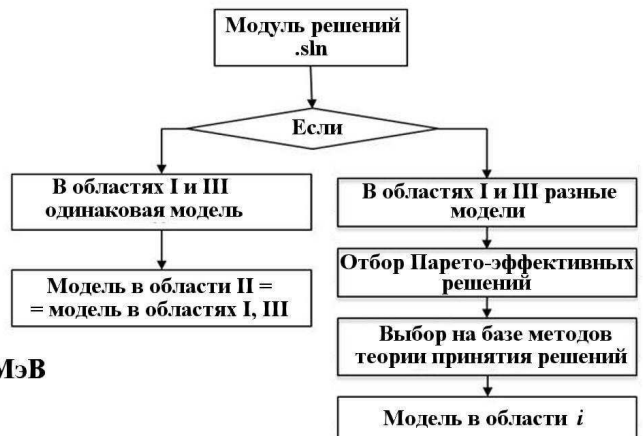


Рис. 5. Отбор моделей в InIS HAND



Факторы согласия

| Фактор | Формула | Примечание |
|------------|--|--|
| F | $\langle F \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N F_i}{N} = 10 \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\lg(\sigma_i^{exp}) - \lg(\sigma_i^{calc}))^2}{N}}$ | Оценка интегральной близости к эксперименту при условии, что данные могут сильно различаться |
| H | $H = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right]^2}$ | Показатель степени отражает допустимую степень компенсации малых значений одних слагаемых большими значениями других. Чем больше значение показателя, тем больше степень возможной компенсации |
| D | $D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left \frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right $ | Оценка интегральной близости к эксперименту при условии обеспечения примерно одинакового вклада различных областей |
| L | $L = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right]^2 \left[\frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\sigma_i^{calc}} \right]^2}{\sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right]^2}}$ | Оценка интегральной относительной близости к эксперименту |
| R | $R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i^{calc}}{\sigma_i^{exp}}$ | Оценка тенденций поведения сечений |
| Корреляция | $cor = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_i^{exp} - \langle \sigma^{exp} \rangle) (\sigma_i^{calc} - \langle \sigma^{calc} \rangle)}{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_i^{exp} - \langle \sigma^{exp} \rangle) \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_i^{calc} - \langle \sigma^{calc} \rangle)}$ | Оценка тенденций поведения сечений |

Результаты сравнительного анализа моделей реакций глубокого расщепления.

Сравнительный анализ факторов согласия по моделям, входящим в "Benchmark of Spallation Models", для реакций $^{nat}\text{Pb}(p, x)$ представлен в табл. 4. Светло-серым цветом в таблице отмечены модели (incl4abla, incl4gemini, incl4simm), рекомендованные экспертами МАГАТЭ. Модели, рассчитанные по совокупности факторов согласия, которые удовлетворяют условию парето-оптимальности (CASCADE/ASF, CEM2k, g4bic, phits4jam, CASCADeX 1.2), в данной и последующих таблицах выделены более темным цветом. Разница указанных совокупностей указывает на различия при использовании одно- и многофакторного подходов к выбору наилучшей модели из тех, по которым были осуществлены расчеты в ходе реализации проекта.

В рамках многофакторного анализа проведено сравнение модели CASCADeX 1.2 с моделями расчета высокоэнергетических нуклон-нуклонных реакций, входящих в программный комплекс MCNPX. По программе CASCADeX 1.2 были выполнены расчеты фак-

торов для различной пороговой энергии на основании экспериментов, использованных в работе [13]. Результаты представлены в табл. 5, 6, где использованы обозначения: N — количество экспериментальных точек; $\sigma_{\text{пол}}$ — полное сечение неупругого рассеяния; E_p — энергия налетающего протона.

Обработка всей совокупности данных для ^{184}W на основе методов многокритериального анализа показала преимущества моделей Bertini/Dresner, CASCADE, CASCADE/ASF, CASCADeX 1.2. Анализ параметра пороговой энергии показал наилучшее совпадение с экспериментом при пороговой энергии 0 и 50 МэВ для ^{184}W . Более того, при условии, что все факторы одинаково значимы и в качестве агрегированного показателя эффективности используется их линейная свертка, CASCADE/ASF представляет собой наилучшую модель для расчета сечений реакции $^{184}\text{W}(p, x)$ при соответствующих энергиях налетающей частицы.

В случае с ^{59}Co эффективными оказались модели, реализованные в программах Bertini/Dresner, INCL4/Dresner, CEM2k, CAS-

Факторы согласия для реакций ${}^{\text{nat}}\text{Pb}(p, x)$ в интегральном расчете ($N = 279$)

| Модель | H | D | R | F | Количество полученных расчетных точек |
|---------------|-------|------|------|-------|---------------------------------------|
| CASCADE | 6,17 | 0,69 | 0,91 | 5,14 | 276 |
| CASCADE/ASF | 4,62 | 0,49 | 0,91 | 2,57 | 278 |
| CASCADEx 1.2 | 5,82 | 0,71 | 0,46 | 10,98 | 261 |
| CEM2k | 4,84 | 0,51 | 1,05 | 2,44 | 279 |
| CEM03 | 5,21 | 0,56 | 1,06 | 2,46 | 279 |
| g4bert | 14,80 | 1,02 | 1,40 | 4,00 | 266 |
| g4bic | 4,39 | 0,53 | 0,69 | 3,73 | 258 |
| incl4abla | 9,61 | 0,81 | 1,51 | 2,04 | 264 |
| incl4gemini | 20,26 | 1,28 | 2,04 | 2,48 | 250 |
| incl4smm | 9,57 | 0,87 | 1,27 | 3,67 | 263 |
| BertDres | 7,37 | 0,72 | 1,15 | 2,59 | 279 |
| IsabelaAbla | 13,13 | 1,08 | 1,77 | 2,29 | 250 |
| IsabelGemini | 30,30 | 1,70 | 2,49 | 2,79 | 240 |
| Isabelasmm | 10,04 | 0,92 | 1,35 | 4,04 | 250 |
| Phitsjqmd | 42,86 | 2,23 | 2,26 | 6,43 | 270 |
| phits4jam | 5,63 | 0,54 | 0,93 | 2,12 | 277 |
| phits/bertini | 6,75 | 0,61 | 1,16 | 2,08 | 277 |

CADeX 1.2, с пороговой энергией, равной 50 МэВ. При этом наилучшей моделью (при условии, что все факторы равнозначны) стала модель CASCADEx 1.2. Необходимо также отметить, что решения по моделям Bertini/Dresner и CASCADEx 1.2 для данных реакций всегда входят в совокупность парето-эффективных.

Верификация и валидация библиотек активационных ядерных данных JENDL/HE-2007 и HEAD-2009 на основе экспериментальной базы данных EXFOR. Сегодня в мире существует две высокоэнергетические библиотеки оцененных активационных ядерных данных, содержащие данные по сечениям образования остаточных ядер в реакциях с нуклонами в широком массово-энергетическом диапазоне. Это библиотека JENDL/HE-2007 [14], являющаяся частью японской библиотеки оцененных ядерных данных JENDL, и библиотека HEAD-2009 [15], разработанная в России. В табл. 7 приведено сравнение указанных библиотек.

С помощью интерактивного комплекса InIS HAND была проведена валидация данных из библиотек HEAD-2009 и JENDL/HE-2007 и верификация полученных результатов на основе результатов экспериментов из базы данных EXFOR [16]. Всего было отобрано 103 реакции,

для которых есть данные в EXFOR. Для этих реакций была рассчитана совокупность факторов согласия между данными из EXFOR и библиотек JENDL/HE-2007 и HEAD-2009. Предварительно была сделана сплайн-интерполяция данных из библиотеки EXFOR там, где это было необходимо. Для 69 реакций среднеквадратичные отклонения между данными из библиотек EXFOR и HEAD-2009 оказались меньше, чем среднеквадратичные отклонения между данными из библиотек EXFOR и JENDL/HE-2007.

Посчитать корреляцию между данными из EXFOR, JENDL/HE-2007 и HEAD-2009 для большинства реакций не представляется возможным. Программа JAM, по которой проводились расчеты данных из библиотеки JENDL/HE-2007 в области энергий свыше 350 МэВ, основана на методах квантовой молекулярной динамики, а программа GNASH, по которой проводились расчеты в области ниже 250 МэВ, — на подходе Хаузер—Фешбаха. В ряде случаев в диапазоне энергий 250—350 МэВ возникает нефизический скачок в значениях сечений.

На рис. 6, 7 приведены примеры сравнения данных из EXFOR и библиотек JENDL/HE-2007 и HEAD-2009. На рис. 7 можно наблюдать пример скачка в значениях сечений образования остаточных ядер, обусловленного применением программ, основанных на двух различных под-

Таблица 5

Факторы согласия для различных моделей для реакции $p+^{184}\text{W}$

| Модель | $E_p = 0,8 \text{ ГэВ}, N = 67,$ $\sigma_{\text{non}} = 1 \text{ 636 мбарн}$ | | | | $E_p = 1,6 \text{ ГэВ}, N = 91,$ $\sigma_{\text{non}} = 1 \text{ 687 мбарн}$ | | | | Интегральный расчет, $N = 158$ | | | |
|-----------------------|---|------|------|-------|---|------|------|--------|-----------------------------------|------|------|---------|
| | H | D | R | F | H | D | R | F | H | D | R | F |
| Bertini/Dresner | 5,08 | 0,38 | 0,83 | 1,76 | 6,89 | 0,48 | 0,87 | 1,87 | 6,19 | 0,44 | 0,85 | 1,82 |
| Bertini/ABLA | 5,04 | 0,39 | 0,83 | 2,28 | 5,67 | 0,44 | 0,89 | 2,63 | 5,41 | 0,42 | 0,86 | 2,48 |
| ISABEL/Dresner | 5,05 | 0,37 | 0,78 | 2,13 | 5,45 | 0,44 | 0,80 | 2,60 | 5,28 | 0,41 | 0,79 | 2,40 |
| ISABEL/ABLA | 5,35 | 0,38 | 0,78 | 2,13 | 5,91 | 0,40 | 0,83 | 2,83 | 5,68 | 0,41 | 0,81 | 2,58 |
| INCL4/Dresner | 5,56 | 0,41 | 0,75 | 2,2 | 5,25 | 0,38 | 0,79 | 2,73 | 5,38 | 0,39 | 0,77 | 2,51 |
| INCL4/ABLA | 6,18 | 0,43 | 0,75 | 2,54 | 6,08 | 0,40 | 0,85 | 2,57 | 6,12 | 0,41 | 0,81 | 2,56 |
| CEM2k | 4,85 | 0,43 | 0,80 | 2,89 | 5,88 | 0,45 | 0,89 | 3,6 | 5,47 | 0,42 | 0,85 | 3,30 |
| CASCADE | 4,72 | 0,39 | 0,78 | 1,65* | 4,9 | 0,35 | 0,83 | 2,85** | 4,82 | 0,37 | 0,81 | 2,39*** |
| CASCADE/ASF | 4,34 | 0,33 | 0,86 | 1,57 | 4,51 | 0,33 | 0,87 | 1,69 | 4,44 | 0,33 | 0,87 | 1,64 |
| CASCADEx 1.2 (50 МэВ) | 5,64 | 0,43 | 0,69 | 1,65* | 4,89 | 0,36 | 0,75 | 4,63** | 5,20 | 0,39 | 0,73 | 3,40*** |

* $N = 58.$

** $N = 86.$

*** $N = 144.$

Таблица 6

Факторы согласия для различных моделей для реакции $p+^{59}\text{Co}$

| Модель | $E_p = 1,2 \text{ ГэВ}, N = 20,$ $\sigma_{\text{non}} = 772 \text{ мбарн}$ | | | | $E_p = 1,6 \text{ ГэВ}, N = 20,$ $\sigma_{\text{non}} = 773 \text{ мбарн}$ | | | | $E_p = 2,6 \text{ ГэВ}, N = 20,$ $\sigma_{\text{non}} = 770 \text{ мбарн}$ | | | | Интегральный расчет, $N = 60$ | | | |
|-----------------------|---|------|------|------|---|------|------|------|---|------|------|------|----------------------------------|------|------|------|
| | H | D | R | F | H | D | R | F | H | D | R | F | H | D | R | F |
| Bertini/Dresner | 4,87 | 0,32 | 0,70 | 1,74 | 4,51 | 0,33 | 0,71 | 1,96 | 4,29 | 0,32 | 0,71 | 1,76 | 4,56 | 0,32 | 0,71 | 1,82 |
| Bertini/ABLA | 15,85 | 0,81 | 1,5 | 2,07 | 13,79 | 0,81 | 1,43 | 2,11 | 13,71 | 0,8 | 1,42 | 2,11 | 14,71 | 0,81 | 1,45 | 2,1 |
| ISABEL/Dresner | 4,58 | 0,28 | 0,89 | 1,58 | 5,66 | 0,33 | 1,01 | 1,65 | 5,78 | 0,34 | 1,15 | 1,55 | 5,37 | 0,32 | 1,02 | 1,59 |
| ISABEL/ABLA | 21,17 | 1,1 | 1,83 | 2,31 | 23,16 | 1,27 | 2,04 | 2,45 | 28,15 | 1,63 | 2,38 | 2,75 | 24,34 | 1,33 | 2,08 | 2,5 |
| INCL4/Dresner | 4,16 | 0,25 | 0,91 | 1,56 | 4,30 | 0,25 | 0,95 | 1,51 | 4,42 | 0,27 | 1,03 | 1,47 | 4,29 | 0,26 | 0,96 | 1,51 |
| INCL4/ABLA | 20,35 | 1,02 | 1,78 | 2,21 | 20,05 | 1,13 | 1,87 | 2,30 | 26 | 1,45 | 2,23 | 2,55 | 22,3 | 1,2 | 1,96 | 2,35 |
| CEM2k | 6,52 | 0,41 | 0,93 | 1,78 | 5,82 | 0,37 | 0,84 | 1,78 | 5,23 | 0,36 | 0,8 | 1,86 | 5,88 | 0,38 | 0,86 | 1,81 |
| CASCADE | 12,79 | 0,6 | 1,12 | 2,52 | 11,80 | 0,59 | 1,11 | 2,38 | 10,26 | 0,58 | 1,08 | 2,31 | 11,66 | 0,59 | 1,1 | 2,4 |
| CASCADE/ASF | 6,02 | 0,36 | 1,1 | 1,5 | 5,51 | 0,37 | 1,09 | 1,48 | 5,51 | 0,37 | 1,08 | 1,49 | 5,69 | 0,37 | 1,09 | 1,49 |
| CASCADEx 1.2 (50 МэВ) | 3,50 | 0,22 | 0,99 | 1,32 | 3,47 | 0,23 | 1,01 | 1,38 | 3,85 | 0,27 | 1,03 | 1,39 | 3,61 | 0,24 | 1,01 | 1,36 |

Сравнение библиотек HEAD-2009 и JENDL/HE-2007

| Библиотека | Первичные частицы | Общее количество изотопов | Зарядовый диапазон изотопов | Энергетический диапазон первичных нуклонов | Шаг расчета в диапазоне энергий 150–1 000 МэВ | Программы, примененные для расчетов |
|---------------|-------------------|---------------------------|-----------------------------|--|---|---|
| HEAD-2009 | Протоны | 682 | 1–84 | 150–1 000 МэВ | 150–250 МэВ: 5 МэВ, 250–600 МэВ: 25 МэВ, 600–1 000 МэВ: 50 МэВ (всего 33 значения) | MCNPX 2.6 C CASCADE/ ASF |
| | Нейтроны | 682 | 1–84 | 150–1 000 МэВ | 150–250 МэВ: 5 МэВ, 250–600 МэВ: 25 МэВ, 600–1 000 МэВ: 50 МэВ (всего 33 значения) | MCNPX 2.5 D MCNPX 2.6 C CASCADE/ ASF |
| JENDL/HE-2007 | Протоны | 106 | 1–95 | До 3 000 МэВ | 150–250 МэВ: 10 МэВ и точки 350, 500, 600, 700, 800, 1 000, 1 500, 2 000, 3 000 МэВ (всего 20 значений) | GNASH JAM |
| | Нейтроны | 106 | 1–95 | До 3 000 МэВ | 150–250 МэВ: 10 МэВ и точки 350, 500, 600, 700, 800, 1 000, 1 500, 2 000, 3 000 МэВ (всего 20 значений) | GNASH JAM |

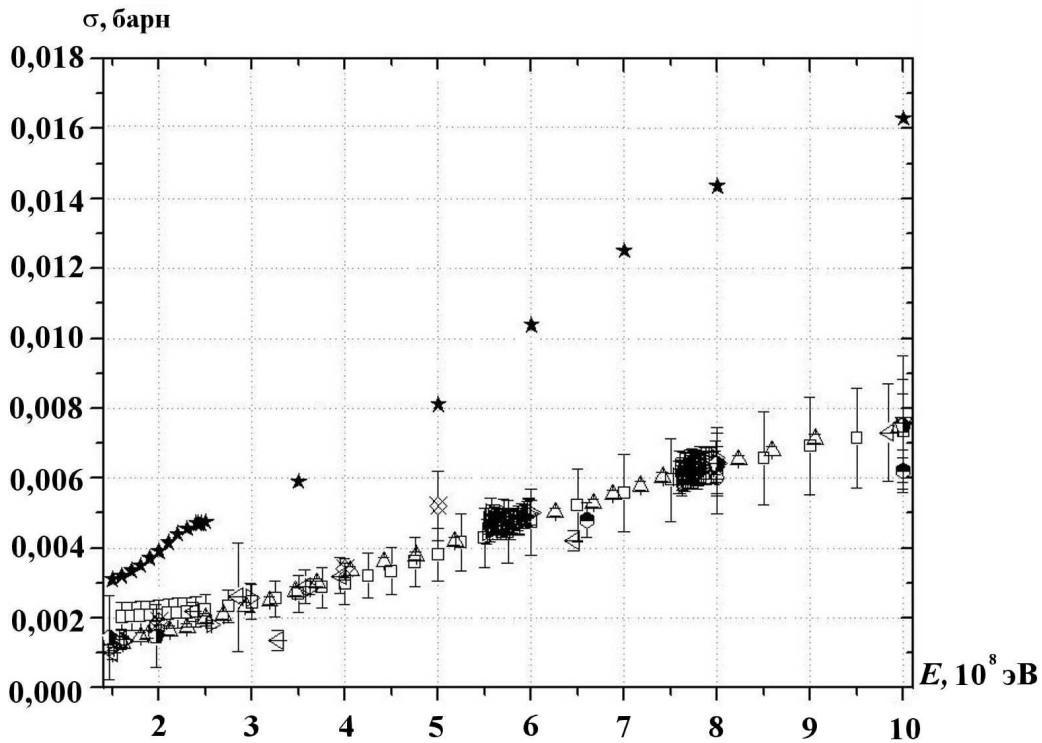


Рис. 6. Сечение образования изотопа ${}^7\text{Be}$ в реакции ${}^{27}\text{Al}(p, x)$: \square — HEAD-2009; \star — JENDL/HE-2007; другие маркеры — EXFOR (1958–2003 гг.)

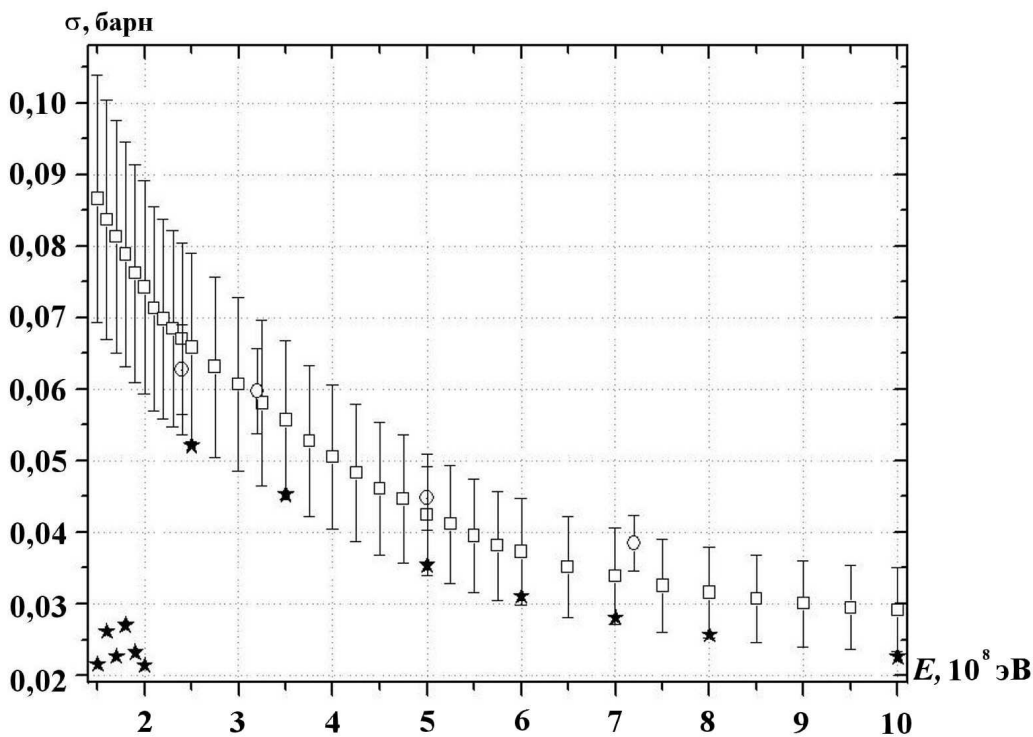


Рис. 7. Сечение образования изотопа ^{89}Zr в реакции $^{93}\text{Nb}(p, x)$: \square — HEAD-2009; \star — JENDL/HE-2007; \circ — EXFOR (1964 г.)

ходах к описанию высокоэнергетических взаимодействий. Применение же каскадно-предравновесно-испарительных моделей не приводит к появлению таких разрывов.

Заключение

Разработанные системы IViS SMPI и InIS HAND компьютерного моделирования высокоэнергетических ядерных реакций и подготовки активационных ядерных данных представляют собой инструменты, предназначенные для ускорения научных и проектных исследований в области константного обеспечения расчетов инновационных ядерно-энергетических установок. Данные программные средства обеспечивают возможности многовариантных серийных расчетов, обоснованного выбора параметров моделей по результатам количественного сопоставления с экспериментом и включают в себя широкий спектр средств обработки и представления результатов расчетов.

Описанные системы могут быть использованы в учебном процессе при освоении соответствующих курсов, а также полезны специалистам, работающим в смежных предметных областях

и не имеющим возможности углубляться в тонкости, связанные с особенностью использования отдельных программных средств.

Авторы выражают благодарность Н. К. Калугину, Л. И. Светличному, А. А. Договору за помощь в проведении расчетов, представленных в данной работе.

Список литературы

1. Benchmark of Spallation Models. http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php/Main_Page.
2. Leray S. Needs for a benchmark of spallation models for reliable simulation of spallation related applications // PSI Proc. 09-01 ARIA. January, 2009. P. 89.
3. Hendricks J. S. MCNPX Version 26C. LA-UR-06-7991. Los-Alamos, 2006.
4. GEANT 4 Code Description. <http://geant4.web.cern.ch/geant4/>.
5. FLUKA Code Description. <http://www.fluka.org>.

6. Boudard A., Cugnon J., Leray S., Volant C. Intranuclear cascade model for a comprehensive description of spallation reaction data // Phys. Rev. C. 2002. Vol. 66. P. 044615 (1–28).
7. Mashnik S. G., Gudima K. K., Baznat M. I. et al. LANL Report LA-UR-06-1764. Los-Alamos, 2006.
8. Барашенков В. С., Тонеев В. Д. Взаимодействие высокоэнергетических частиц и атомных ядер с ядрами. М.: Атомиздат, 1972.
9. Барашенков В. С., Конобеев А. Ю., Коровин Ю. А., Соснин В. Н. Компьютерная программа CASCADE/INPE // Атомная энергия. 1999. № 87. С. 283.
10. Andrianov A. A., Korovin Yu. A., Kup-tsov I. S., Stankovskiy A. Yu. Interactive information system for preparation and verification of nuclear data in the high-energy range // J. of the Korean Physical Society. 2011. Vol. 59, No. 23. P. 1096–1099.
11. Андрианов А. А., Коровин Ю. А., Купцов И. С. и др. Справочно-информационный интерактивный комплекс подготовки и верификации ядерно-физических данных в высокоэнергетической области // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2009. № 3. С. 66–76.
12. Microsoft Development Library Online Resource. <http://msdn.microsoft.com>.
13. Broeders C. H. M., Konobeyev A. Yu., Mercatali L. Uncertainty in cross-section calculations for reactions induced by neutrons with energy above 0,1 MeV // Kerntechnik. 2006. Vol. 71. P. 174.
14. High Energy Nuclear Data Library JENDL. <http://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jendl-he-2007/>.
15. Korovin Yu. A., Natalenko A. A., Stankovskiy A. Yu. et al. High energy activation data library (HEAD-2009), Nuclear instruments and methods // Phys. Research A. 2010. Vol. 624, Issue 1. P. 20–26.
16. On Behalf of the Nuclear Reaction Data Centres Network: EXFOR Formats Description for Users (EXFOR Basis) / Ed. by O. Schwerer. IAEA-NDS-206. June 2008.

Статья поступила в редакцию 07.02.12.

УДК 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ПРИ ДВИЖЕНИИ ГАЗОВОДОНЕФТЯНОЙ СМЕСИ В КАНАЛАХ ЦЕНТРОБЕЖНОГО ЭЛЕКТРОНАСОСА

В. М. Конюхов, И. В. Конюхов
(КФУ, г. Казань)

Построена математическая модель переходных термогидродинамических процессов в погружном многоступенчатом электроцентробежном насосе при замещении воды трехфазной смесью на этапе вывода нефтяной добывающей скважины на эксплуатационный режим. Разработаны численная модель и соответствующий программный комплекс. На основе вычислительных экспериментов изучены особенности замещения воды водонефтегазовой смесью в каналах насосного узла и изменение рабочих характеристик ступеней насоса.

Ключевые слова: численное моделирование, переходные процессы, тепломассоперенос, многофазные потоки, электроцентробежный насос.

Введение

Вывод нефтяной скважины, оборудованной погружной установкой многоступенчатого электроцентробежного насоса (УЭЦН), на рабочий установившийся режим после ремонта подземного оборудования сопровождается взаимосвязанными переходными нестационарными процессами тепломассопереноса, происходящими в пласте, трубах скважины, кольцевом затрубном пространстве и каналах электроцентробежного насоса (ЭЦН) [1]. После включения двигателя насос начинает откачивать из лифтовых труб воду, которую закачивают в скважину с целью ее глушения перед проведением ремонтных работ. По мере снижения уровня воды в затрубном пространстве происходит увеличение депрессии на забое скважины и интенсификация притока водонефтяной смеси из пласта. Двухфазная смесь постепенно вытесняет воду в обсадной колонне (ОК) скважины на участке ниже координаты $z_{вх}$ подвески УЭЦН (рис. 1). При давлении ниже давления насыщения нефти газом в данной области из нефтяной фазы начинает выделяться свободный газ, растворенный в ней в пластовых условиях, и образуется трехфазная водонефтегазовая смесь, движущаяся вверх вдоль ствола ОК к приему УЭЦН. Насос работает на воде до тех пор, пока смесь не достигнет точки $z_{вх}$ входа в насосный узел (см. рис. 1). После этого в ступенях ЭЦН начинается замещение воды смесью: нижние ступени насоса перекачивают трехфазную смесь, а верхние продолжают работать на однофазной жидкости (воде). При наличии газосепаратора (ГС) в составе УЭЦН часть свободного газа может отводиться в затрубное пространство и не попадает на вход насосного узла.

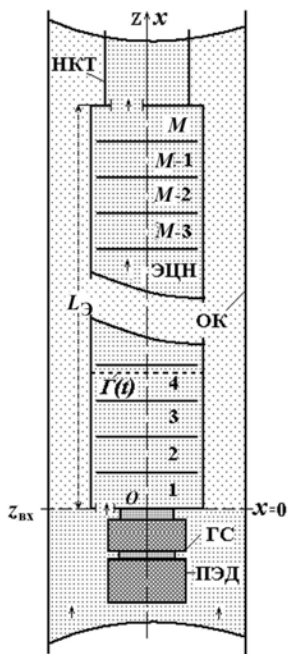


Рис. 1. Участок нефтяной скважины, оборудованной УЭЦН

Подвижная граница Γ раздела между областями многофазного и водяного потоков перемещается вдоль ступеней насосного узла к выходу из ЭЦН в насосно-компрессорные трубы (НКТ). При этом рабочие характеристики нижних ступеней ЭЦН (напор, КПД, подача), перекачивающих водонефтегазовую смесь, значительно снижаются, а сила тока и мощность на валу погружного электродвигателя (ПЭД) установки возрастают. В результате может произойти перегрев ПЭД и его выход из строя. Поэтому для контроля эксплуатационных параметров УЭЦН используются наземные станции управления (СУ), в контроллерах которых устанавливаются допустимые временные интервалы работы двигателя в различных экстремальных аварийных режимах. При возникновении аварийной ситуации контроллер начинает временной отсчет, по истечении которого срабатывает защитное отключение ПЭД, если за это время он не возвращается в нормальный режим работы. После отключения УЭЦН срабатывает обратный клапан, предотвращающий обратное течение воды из НКТ через насос в кольцевое пространство скважины, в котором начинается повышение уровня жидкости за счет ее притока из пласта в скважину. Восстановление уровня происходит на фоне увеличения забойного давления, а также давления на приеме УЭЦН. Данный этап сопровождается понижением температуры ПЭД, так как смесь, движущаяся из ОК в затрубное пространство, обтекает двигатель и постепенно охлаждает его. Продолжительность этапа отключения устанавливается в контроллере СУ. По завершении отсчета контроллером временного интервала простоя УЭЦН происходит автоматическое включение ПЭД и продолжение вывода скважины на рабочий режим. Особенностью следующего этапа является постепенное замещение водяного столба в НКТ смесью, поступающей на вход НКТ из насоса.

Поскольку временные ограничения (защитные уставки) контроллера СУ по продолжительности сопоставимы с характерными временами переходных процессов при замещении воды смесью в ЭЦН, это следует учитывать при расчете процессов вывода скважины на рабочий режим. В данной работе основное внимание уделяется численному моделированию переходных термогидродинамических процессов в одном из элементов системы *пласт—скважина—УЭЦН*, а именно в каналах насосного узла.

Математическое описание

Направим координатную ось Ox вертикально вверх вдоль оси Oz скважины, а ее начало поместим на входе в первую ступень ЭЦН (см. рис. 1). Определим относительное положение потока в насосном узле координатой x , $0 \leq x \leq L_{\text{Э}}$, где $L_{\text{Э}} = l_c M$ — длина пакета ступеней, l_c — длина отдельной ступени, M — общее число ступеней в насосном узле. Пусть x и $x + \Delta x$ — соответственно координаты приема и выкида некоторой ступени, $\Delta x = l_c$. Трехфазная смесь, движущаяся вдоль насосного узла, сильно диспергирована [2] из-за огромной скорости вращения лопаток ступени (~ 50 об/с). Это позволяет считать равными истинное φ_i и объемное β_i содержания i -й фазы: $\varphi_i \equiv \beta_i$ ($i = 1, 2, 3$), а также скорости фаз и смеси: $w_i = w$. Здесь и в дальнейшем нижний индекс $i = 1, 2, 3$ служит для обозначения параметров нефтяной, газовой и водяной фазы соответственно. Пренебрегая капиллярными эффектами на границах раздела непрерывной и дисперсных фаз, положим $p_1 \equiv p_2 \equiv p_3 \equiv P$. Введем обозначения

$$\Delta_{\tau} [Y] = Y(\tilde{x}, \tau + \Delta\tau) - Y(\tilde{x}, \tau); \quad \Delta_x [Y] = Y(x, \tau) - Y(x + \Delta x, \tau)$$

и запишем соотношения, выражающие балансы масс нефтяной, газовой и водяной фаз в произвольной ступени ЭЦН:

$$\begin{aligned} \Delta_{\tau} [\rho_1 \varphi_1] V_c &= \Delta_x [\rho_1 \varphi_1 w] f_{\text{Э}} \Delta\tau - J(\tau, \tilde{x}) \Delta\tau V_c; \\ \Delta_{\tau} [\rho_2 \varphi_2] V_c &= \Delta_x [\rho_2 \varphi_2 w] f_{\text{Э}} \Delta\tau + J(\tau, \tilde{x}) \Delta\tau V_c; \\ \Delta_{\tau} [\rho_3 \varphi_3] V_c &= \Delta_x [\rho_3 \varphi_3 w] f_{\text{Э}} \Delta\tau. \end{aligned}$$

Здесь $\tilde{x} \in [x, x + \Delta x]$; J — массовая скорость перехода газа из свободного состояния в раствор нефти и газа при повышении давления до давления насыщения $P_{\text{н}}$; ρ_i — плотность i -й фазы; $\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 = 1$; $V_c = f_{\text{Э}} \Delta x = f_{\text{Э}} l_c$ — объем области проточных каналов ступени ЭЦН, где $f_{\text{Э}} = \pi r_{\text{Э}}^2$, $r_{\text{Э}}$ —

эффективный радиус каналов. Нетрудно видеть, что $\frac{\Delta\tau[Y]}{\Delta\tau} \rightarrow \frac{\partial Y}{\partial\tau}$, когда $\Delta\tau \rightarrow 0$. При больших значениях $L_{\text{Э}}$ величина Δx имеет малые значения, так что разностные отношения $\frac{\Delta x[Y]}{\Delta x}$ в правых частях балансовых соотношений можно заменить производными $\frac{\Delta x[Y]}{\Delta x} \approx \frac{\partial Y}{\partial x}$. В итоге получим дифференциальные уравнения неразрывности фаз:

$$\frac{\partial(\rho_1\varphi_1)}{\partial\tau} + \frac{\partial(\rho_1\varphi_1 w)}{\partial x} = -J; \quad \frac{\partial(\rho_2\varphi_2)}{\partial\tau} + \frac{\partial(\rho_2\varphi_2 w)}{\partial x} = J; \quad \frac{\partial(\rho_3\varphi_3)}{\partial\tau} + \frac{\partial(\rho_3\varphi_3 w)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

в которых переменная x связана с безразмерной переменной $\xi = x/L_{\text{Э}}$, выражающей долю ступеней насосного узла, пройденных потоком. Уравнения (1) по своей форме идентичны общепринятым уравнениям неразрывности при течении газожидкостных смесей [3–6].

Соотношение, описывающее массообменные процессы между нефтяной и газовой фазами и определяющее величину J в уравнениях (1), может быть получено аналогично [5, 6] и имеет вид

$$J = \frac{\rho_1(1 - \varphi_2 - \varphi_3)}{1 - C_{\text{н}}F} \left(\frac{\partial(C_{\text{н}}F)}{\partial\tau} + w \frac{\partial(C_{\text{н}}F)}{\partial x} \right), \quad \varphi_2 > 0, \quad (2)$$

где

$$F(P, T) = F^*(P) + \delta_F^*(P)(T - T^*);$$

$$F^*(P) = \begin{cases} 1 - \sqrt[3]{\frac{P}{P_{\text{н}}}}, & P < P_{\text{н}}; \\ 0, & P \geq P_{\text{н}}; \end{cases} \quad \delta_F^*(P) = \begin{cases} 0,007 \frac{P}{P_{\text{н}}} \left(1 - \frac{P}{P_{\text{н}}}\right) e^{-1,556P/P_{\text{н}}}, & P < P_{\text{н}}; \\ 0, & P \geq P_{\text{н}}; \end{cases}$$

$$C_{\text{н}} = \frac{\rho_2^0 V_0(T)}{\rho_{1\text{пл}}}, \quad V_0(T) = \frac{V_{\text{г}}(T)}{F(P_0, T)}, \quad V_{\text{г}} = V_{\text{г}}^0 [1 + b_{\text{г}}(T - T_0)]; \quad P_{\text{н}} = P_{\text{н}}^0 + b_{\text{Т}}(T - T_0).$$

Здесь F — обобщенный коэффициент растворимости газа в нефти при давлении P и температуре T ; F^* и δ_F^* — коэффициент растворимости и угловой коэффициент при некотором характерном значении температуры T^* и соответствующем давлении насыщения $P_{\text{н}}^*$; $C_{\text{н}}$ — массовая концентрация газа, растворенного в нефтяной фазе в пластовых условиях; V_0 — нормальный объем газа, выделяющийся из нефтяной фазы при $P = 0$; ρ_2^0 — плотность газа при нормальных условиях ($P^0 = 0,1013$ МПа; $T^0 = 273,15$ К); $\rho_{1\text{пл}}$ — плотность нефти при пластовых условиях; $V_{\text{г}}$ и $V_{\text{г}}^0$ — газовый фактор пластовой нефти при $P = P^0$ и температуре T и T^0 соответственно; $P_{\text{н}}^0$ — давление насыщения при $T = T^0$; $b_{\text{г}}$, $b_{\text{Т}}$ — коэффициенты.

Отметим, что формула (2) получена в предположении равновесности массообменных процессов в смеси при ее движении в каналах ЭЦН, поскольку влияние эффекта неравновесности на гидродинамические характеристики насосов, перекачивающих реальные промышленные смеси, составляет (по оценкам [7]) всего лишь несколько процентов.

Приращение давления на участке $[x, x + \Delta x]$ равно $\Delta_x[P] = g\rho\Delta H$, где ΔH — напор, развиваемый ступенью; ρ — средняя по сечению $f_{\text{Э}}$ плотность смеси; g — ускорение свободного падения. Отсюда получим дифференциальное уравнение [5, 6], выполняющее в рассматриваемом случае роль закона сохранения количества движения смеси:

$$l_c \frac{\partial P}{\partial x} = g\rho\Delta H. \quad (3)$$

Уравнение сохранения энергии учитывает ее изменение за счет эффектов сжимаемости, фазовых переходов и нагрева трехфазной смеси при течении в каналах ЭЦН:

$$\sum_{i=1}^3 \rho_i \varphi_i C_{P_i} \frac{dT}{d\tau} = T \sum_{i=1}^3 \alpha_{P_i \varphi_i} \frac{dP}{d\tau} - JL + \frac{Q}{f_{\text{Э}}} \frac{1 - \eta}{\eta} \frac{\partial P}{\partial x}. \quad (4)$$

Здесь α_{Pi} , α_{Ti} , C_{Pi} — коэффициенты теплового расширения, объемной упругости, удельной изобарной теплоемкости i -й фазы в потоке; L — скрытая теплота фазовых переходов; $\eta = g\rho\Delta H Q/\Delta N$, $Q = G/\rho$ и ΔN — соответственно КПД, объемный расход смеси и потребляемая мощность, характеризующие работу отдельной ступени насосного узла; $\frac{d}{d\tau} = \frac{\partial}{\partial\tau} + w\frac{\partial}{\partial x}$ — субстанциональная производная. По своей структуре уравнение (4) аналогично соответствующему уравнению энергии водонефтегазового потока в лифтовых трубах скважины.

Отметим также, что нестационарная модель (1)–(4) обобщает уравнения стационарного теплопереноса [5, 6], происходящего в каналах ЭЦН при движении многофазных потоков, и дополняется соотношениями для расчета параметров фаз и смеси:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{\rho_{1\text{пл}}\rho_{1\text{дег}}(1 - C_{\text{н}}F)[1 - \alpha_{P1}(T - T_{\text{пл}}) + \alpha_{T1}(P - P_{\text{пл}})]}{\rho_{1\text{дег}}(1 - F) + \rho_{1\text{пл}}F(1 - C_{\text{н}})[1 - \alpha_{P1}(T - T_0) + \alpha_{T1}(P_0 - P_{\text{пл}})]}; & \rho_2 &= \frac{P}{gZ_{\text{г}}RT}; \\ \rho_3 &= \rho_{3\text{пл}}[1 - \alpha_{P3}(T - T_{\text{пл}}) + \alpha_{T3}(P - P_{\text{пл}})]; & \rho &= \rho_1 + \varphi_2(\rho_2 - \rho_1) + \varphi_3(\rho_3 - \rho_1); \\ w &= \frac{G}{f_{\text{э}}\rho}; & \varphi_2 &= \frac{G_2\rho_1\rho_3}{\rho_3[\rho_1G_2 + \rho_2(G - G_2)] + G_3\rho_2(\rho_1 - \rho_3)}; & \varphi_3 &= \frac{G_3[\rho_1(1 - \varphi_2) + \rho_2\varphi_2]}{\rho_3(G - G_3) + \rho_1G_3}, \end{aligned} \quad (5)$$

где R — универсальная газовая постоянная; $Z_{\text{г}}$ — коэффициент сверхсжимаемости реального газа; $P_{\text{пл}}$ и $T_{\text{пл}}$ — пластовые давление и температура; $\rho_{1\text{пл}}$ и $\rho_{1\text{дег}}$ — соответственно плотность нефти в пластовых условиях ($P = P_{\text{пл}}$, $T = T_{\text{пл}}$) и дегазированной нефти в нормальных условиях; $\rho_{3\text{пл}}$ — плотность воды в пластовых условиях; $G_i = f_{\text{э}}\rho_i\varphi_i w$ и $G = G_1 + G_2 + G_3$ — массовые расходы i -й фазы и трехфазной смеси.

Для определения параметров ΔH , η , ΔN при работе ступени ЭЦН на неоднородной смеси воспользуемся расчетными формулами, полученными на основе модификации методики П. Д. Ляпкина [8]. Можно показать, что в диапазоне относительных подач ступени на воде $0,5 \leq q_{\text{в}} = Q_{\text{в}}/Q_{\text{в}}^* \leq 1,3$ как для ламинарного, так и для турбулентного режима течения напор ΔH ступени при перекачке смеси расходом Q и эффективной вязкостью μ вычисляется с погрешностью $1 \div 2\%$ по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \Delta H &= K_{\text{H}}\Delta H_{\text{в}}(Q_{\text{в}}), & Q_{\text{в}} &= \frac{Q}{K_{\text{Q}}}, & K_{\text{Q}} &= K_{\text{H}} = \frac{Q(\text{Re} - 200)}{Q\text{Re} - 50Q_{\text{в}}^*}, & \text{Re} &= f(n_{\text{S}}) \frac{Q_{\text{в}}^*}{\nu} \sqrt[3]{\frac{\omega}{Q_{\text{в}}^*}}, \\ \nu &= \frac{\mu}{\rho}, & f(n_{\text{S}}) &= \left(4,3 + 0,816n_{\text{S}}^{0,274}\right) n_{\text{S}}^{-0,575}, & n_{\text{S}} &= 193\omega(Q_{\text{в}}^*)^{0,5} (g\Delta H_{\text{в}}^*)^{-0,75}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь и в дальнейшем $Q_{\text{в}}^*$, $\Delta H_{\text{в}}^*$, $\eta_{\text{в}}^*$ — паспортные значения подачи, напора и КПД при работе ступени ЭЦН в оптимальном режиме на воде; $Q_{\text{в}}$, $\Delta H_{\text{в}}$, $\eta_{\text{в}}$ — аналогичные характеристики при $q_{\text{в}} \neq 1$, определяемые по паспортной кривой *напор–подача* ступени; n_{S} — коэффициент быстроходности ступени; ω — угловая скорость вращения вала насоса (ротора электродвигателя); ν — коэффициент эффективной кинематической вязкости смеси. Величина μ зависит от концентрации дисперсных фаз в потоке и определяется по формулам [5, 6] с учетом эффекта инверсии фаз.

Мощность ΔN , потребляемую ступенью ЭЦН, и КПД ступени η при перекачке эмульсии в диапазоне $0,5 \leq q_{\text{в}} \leq 1,3$ определим соотношениями [8]

$$\begin{aligned} \Delta N &= \Delta N_{\text{в}}(Q_{\text{в}}) \frac{\rho}{\rho_3} \frac{K_{\text{Q}}^2}{K_{\eta}}; & \eta &= K_{\eta}\eta_{\text{в}}; & K_{\eta} &= \min(1, \min(K_{\eta,\text{л}}, K_{\eta,\text{т}})), \\ K_{\eta,\text{т}} &= 0,274 \lg \text{Re}_{\text{э}} - 0,06 - 0,14q_{\text{в}}, & K_{\eta,\text{л}} &= 0,485 \lg \text{Re}_{\text{э}} - 0,63 - 0,26q_{\text{в}}, & \text{Re}_{\text{э}} &= K_{\text{Q}}\text{Re}q_{\text{в}}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $K_{\eta,\text{л}}$, $K_{\eta,\text{т}}$ — относительный КПД ступени при ламинарном и турбулентном режимах течения смеси; $\text{Re}_{\text{э}}$ — число Рейнольдса, введенное П. Д. Ляпковым. Зависимости $\Delta N_{\text{в}}(Q_{\text{в}})$ и $\Delta H_{\text{в}}(Q_{\text{в}})$ задаются как табличные функции подачи $Q_{\text{в}}$.

Для пересчета характеристик ступени с воды на неоднородную смесь в диапазонах $0 \leq q_{\text{в}} < 0,5$ и $1,3 < q_{\text{в}} \leq q_{\text{в max}}$ построены зависимости, аналогичные (6), (7), где $q_{\text{в max}}$ — относительная максимальная подача ступени на воде, при которой напор $\Delta H_{\text{в}}$ равен нулю.

Как частные случаи модель (1)–(7) включает в себя уравнения водяного, нефтяного, газонефтяного и водонефтяного потоков. Так, течение воды при $\Gamma(\tau) < x \leq L_{\text{Э}}$, $\tau > 0$, описывается уравнениями (1)–(4) при $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$, $\varphi_3 = 1$:

$$\frac{\partial \rho_3}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho_3 w)}{\partial x} = 0; \quad l_c \frac{\partial P}{\partial x} = g \rho_3 \Delta H; \quad \rho_3 C_{P3} \frac{dT}{d\tau} = T \alpha_{P3} \frac{dP}{d\tau} + \frac{Q}{f_{\text{Э}}} \frac{1 - \eta}{\eta} \frac{\partial P}{\partial x}.$$

Граничные условия на входе в первую ступень ЭЦН при $x = 0$ задают давление, температуру и состав трехфазной смеси:

$$P|_{x=0} = P_{\text{вх}}(\tau); \quad T|_{x=0} = T_{\text{вх}}(\tau); \quad G|_{x=0} = G_{\text{вх}}(\tau); \quad G_2|_{x=0} = G_{2\text{вх}}(\tau); \quad G_3|_{x=0} = G_{3\text{вх}}(\tau);$$

$$T_{\text{вх}} = T_{\Pi} + \frac{N_{\text{д}} - N_{\text{Э}} - V_{\text{к}} \sum_{i=1}^3 \rho_i \varphi_i C_{Pi}^* \frac{\partial T}{\partial \tau}}{\sum_{i=1}^3 G_i C_{Pi}^*},$$

где T_{Π} — температура смеси в скважине на приеме установки (на нижнем торце ПЭД); $N_{\text{д}}$ — мощность, потребляемая ПЭД; $N_{\text{Э}}$ — суммарная мощность, потребляемая всем пакетом ступеней ЭЦН (мощность на валу ПЭД); $V_{\text{к}} = \pi L_{\text{д}} (r_o^2 - r_{\text{д}}^2)$ — объем кольцевого зазора между внутренней поверхностью ОК и внешней поверхностью двигателя радиусами r_o и $r_{\text{д}}$, $L_{\text{д}}$ — его длина; $C_{P1}^* = C_{P1} - \frac{L \partial [\ln(1 - C_{\text{н}} F)]}{\partial T}$; $C_{P2}^* \equiv C_{P2}$; $C_{P3}^* \equiv C_{P3}$.

На границе $\Gamma(\tau)$, перемещающейся вдоль насосного узла со скоростью $\frac{d\Gamma}{d\tau} = w_{\Gamma}$, условия сопряжения $P|_{\Gamma+0} = P|_{\Gamma-0}$; $T|_{\Gamma+0} = T|_{\Gamma-0}$; $\rho^-(w^- - w_{\Gamma}) = \rho_3^+(w^+ - w_{\Gamma})$ связывают решения уравнений в областях трехфазного и однофазного течений.

В начальный момент времени $\tau = 0$ все ступени насоса при $0 \leq x \leq L_{\text{Э}}$ работают на воде, т. е.

$$P|_{t=0} = P_{\text{ст}}(x); \quad T|_{t=0} = T_{\text{ст}}(x); \quad \Gamma|_{t=0} = 0;$$

$$G_1|_{t=0} = 0; \quad G_2|_{t=0} = 0; \quad G_3|_{t=0} = 0 = G_{3\text{ст}}(x) = G_{\text{ст}}(x).$$

Функции $P_{\text{ст}}(x)$, $T_{\text{ст}}(x)$ и $G_{3\text{ст}}(x)$ определяются из решения системы квазистационарных уравнений, которые являются частным случаем уравнений (1)–(4), если в них пренебречь инерционными членами и положить $\varphi_1 = 0$, $\varphi_2 = 0$, $\varphi_3 = 1$.

Возможность изменения режима работы УЭЦН с помощью наземной СУ (например, типа "ЭЛЕКТОН") требует учета зависимости параметров работы ЭЦН и мощности $N_{\text{д}}$, потребляемой ПЭД, от частоты [1]:

$$Q_{\text{в}}^* = \overline{Q}_{\text{в}}^* \frac{\omega}{\omega_{\text{н}}}; \quad \Delta H_{\text{в}}^* = \Delta \overline{H}_{\text{в}}^* \left(\frac{\omega}{\omega_{\text{н}}} \right)^2; \quad \Delta N_{\text{в}}^* = \overline{N}_{\text{в}}^* \left(\frac{\omega}{\omega_{\text{н}}} \right)^3; \quad N_{\text{д}} = \overline{N}_{\text{д}} \frac{\omega}{\omega_{\text{н}}},$$

где $\overline{Q}_{\text{в}}^*$, $\Delta \overline{H}_{\text{в}}^*$, $\Delta \overline{N}_{\text{в}}^*$ и $\overline{N}_{\text{д}}$ — характеристики ступени и двигателя установки при номинальной угловой скорости вращения вала ПЭД ($\omega_{\text{н}} = 50 \text{ Гц}$), а $Q_{\text{в}}^*$, $\Delta H_{\text{в}}^*$, $\Delta N_{\text{в}}^*$ и $N_{\text{д}}$ — при $\omega \neq \omega_{\text{н}}$.

О численной модели

Введем равномерное сеточное разбиение $D_h = \{(x_i, t_j), i = \overline{0, N_x}, j = \overline{0, 1, \dots}\}$, $x_i = ih_x$, $h_x = L_{\text{Э}}/N_x$, $t_j = jh_{\tau}$ исходной области $D = \{(x, \tau), 0 \leq x \leq L_{\text{Э}}, \tau \geq 0\}$ с шагами h_x и h_{τ} . Преобразуем уравнения неразрывности газа, воды и смеси к форме уравнений переноса:

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} + w \frac{\partial G}{\partial x} = f_{\text{Э}} \rho \frac{\partial w}{\partial \tau}; \quad \frac{\partial G_3}{\partial \tau} + w \frac{\partial G_3}{\partial x} = f_{\text{Э}} \rho_3 \varphi_3 \frac{\partial w}{\partial \tau}; \quad \frac{\partial G_2}{\partial \tau} + w \frac{\partial G_2}{\partial x} = f_{\text{Э}} \left(\rho_2 \varphi_2 \frac{\partial w}{\partial \tau} + Jw \right)$$

и запишем неявную разностную схему, аппроксимирующую *против потока* [9] исходные уравнения задачи:

$$\begin{aligned}
 G_{\tau,i}^j + w_i^{j+1} G_{\bar{x},i}^{j+1} &= f \Delta \rho_i^{j+1} w_{\tau,i}^j; & G_{3\tau,i}^j + w_i^{j+1} G_{3\bar{x},i}^{j+1} &= f \Delta \rho_{3i}^{j+1} \varphi_{3i}^{j+1} w_{\tau,i}^j; \\
 G_{2\tau,i}^j + w_i^{j+1} G_{2\bar{x},i}^{j+1} &= f \Delta \rho_{2i}^{j+1} \varphi_{2i}^{j+1} w_{\tau,i}^j + J_i^{j+1} w_i^{j+1}; & P_i^{j+1} &= P_{i-1}^{j+1} + \frac{h_x g \rho_i^{j+1} \Delta H_i^{j+1}}{l_c}; \\
 J_i^{j+1} &= \left(\frac{\rho_1 (1 - \varphi_2 - \varphi_3)}{1 - C_H F} \right)_i^{j+1} \left[(C_H F)_{\tau,i}^j + w_i^{j+1} (C_H F)_{\bar{x},i}^{j+1} \right]; \\
 \sum_{k=1}^3 (\rho_k \varphi_k C_{Pk})_i^{j+1} T_{\tau,i}^j + f \Delta^{-1} \sum_{k=1}^3 (G_k C_{Pk})_i^{j+1} T_{\bar{x},i}^{j+1} &= \\
 &= \left(T \sum_{k=1}^3 \alpha_{Pk} \varphi_k \right)_i^{j+1} P_{\tau,i}^j + V_c^{-1} \left(T \sum_{i=1}^3 \frac{G_k \alpha_{Pk}}{\rho_k} + \frac{1 - \eta}{\eta} \right)_i^{j+1} g (\rho Q \Delta H)_i^{j+1} - J_i^{j+1} L,
 \end{aligned}$$

где $y_{\bar{x},i} = (y_i - y_{i-1})/h_x$, $y_{\tau}^j = (y^{j+1} - y^j)/h_{\tau}$. Полученная система нелинейных алгебраических уравнений решается итерационным методом на каждом пространственном шаге сетки. При этом для устойчивости решения уравнения энергии необходимо использовать дробление временного слоя (~ 10 дополнительных временных слоев). Численная и алгоритмическая модели реализованы в программном комплексе, позволяющем проводить многовариантные расчеты наряду с визуализацией результатов расчетов в ходе решения задачи.

Результаты вычислительных экспериментов

Для демонстрации процесса замещения воды смесью рассмотрим пример, в котором насосная установка включает в себя насосный узел из $M = 240$ ступеней ЭЦНМИК5-600 ($l_c = 7$ см, $V_c = 163$ см³) и погружной электродвигатель ПЭД33-108. Оптимальные параметры работы ступени на воде: $\bar{Q}_B^* = 700$ м³/сут; $\Delta \bar{H}_B^* = 4,77$ м; $\bar{\eta}_B^* = 69,8$ %. Номинальные характеристики ПЭД33-108: $\bar{N}_D^* = 33$ кВт; $\bar{\eta}_D^* = 72$ %. Параметры фаз задаются так, чтобы они в среднем отражали свойства нефти, пластовой воды и попутного газа Ромашкинского месторождения Республики Татарстан: $\rho_{пл} = 806$, $\rho_{дег} = 880$, $\rho_2^0 = 0,716$, $\rho_{пл} = 1000$ [кг/м³]; $\mu_{пл} = 36$, $\mu_{3пл} = 1,6$, $\mu_{дег} = 62$ [мПа·с]; $\alpha_{P1} = 9 \cdot 10^{-3}$, $\alpha_{P2} = \zeta_{P2} + 1/T$, $\zeta_{P2} = \left(\frac{\partial Z_{\Gamma}}{\partial T} \right)_P / Z_{\Gamma} = 8 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_{P3} = 4 \cdot 10^{-3}$ [°C⁻¹]; $\alpha_{T1} = 10^{-3}$, $\alpha_{T2} = \xi_T - 1/P$, $\xi_T = \left(\frac{\partial Z_{\Gamma}}{\partial P} \right)_T / Z_{\Gamma} = 3,5 \cdot 10^{-4}$, $\alpha_{T3} = 8 \cdot 10^{-4}$ [МПа⁻¹]; $C_{P1} = 1,88$, $C_{P2} = 2,7$, $C_{P3} = 4,15$ [кДж/(кг·°C)]; $L = 167,5$ кДж/кг; $Z_{\Gamma} = 0,94$; $V_{\Gamma}^0 = 40$ м³/м³; $P_H^0 = 10$ МПа. Вязкость воды в каналах ЭЦН считается постоянной: $\mu_3 \approx \mu_{3пл}$. Вязкость μ_1 нефти вычислялась по формуле $\mu_1(P, T) = \mu_{1н} (\mu_1^0 / \mu_{1н})^F$, где $\mu_{1н}$ и μ_1^0 — ее значения при $P = P_H$ и $P = 0$ соответственно, F — коэффициент растворимости. Пластовые давление и температура равны $P_{пл} = 16$ МПа и $T_{пл} = 40$ °C.

Рассмотрим сначала ситуацию, когда на входе в насосный узел при $\tau > 0$ заданы постоянные граничные условия: давление $P^0(\tau) = 4$ МПа; температура $T^0(\tau) = 30$ °C; расход $G^0(\tau) = 5,56$ кг/с; водосодержание $\varphi_3^0(\tau) = 30$ %.

В начальный момент времени $\tau = 0$ ЭЦН работает на воде. Распределения функций $P_{ст}(x)$, $T_{ст}(x)$, $\varphi_{3,ст}(x)$ до начала поступления смеси при $G_{3,ст}(x) = G_{ст}(x) = 5,56$ кг/с, $G_{2,ст}(x) = 0$, $G_{1,ст}(x) = 0$ изображены на рис. 2 сплошными линиями. На этом же рисунке показана динамика изменения давления, температуры, газосодержания и водонасыщенности по длине насосного узла на пять моментов времени: $\tau = 0; 2,6; 4,5; 6,6; 8,9$ с. В данном примере продолжительность процесса вытеснения составляет около 9 секунд. Для удобства на рис. 2 наряду с координатой x приведены соответствующие номера ступеней m .

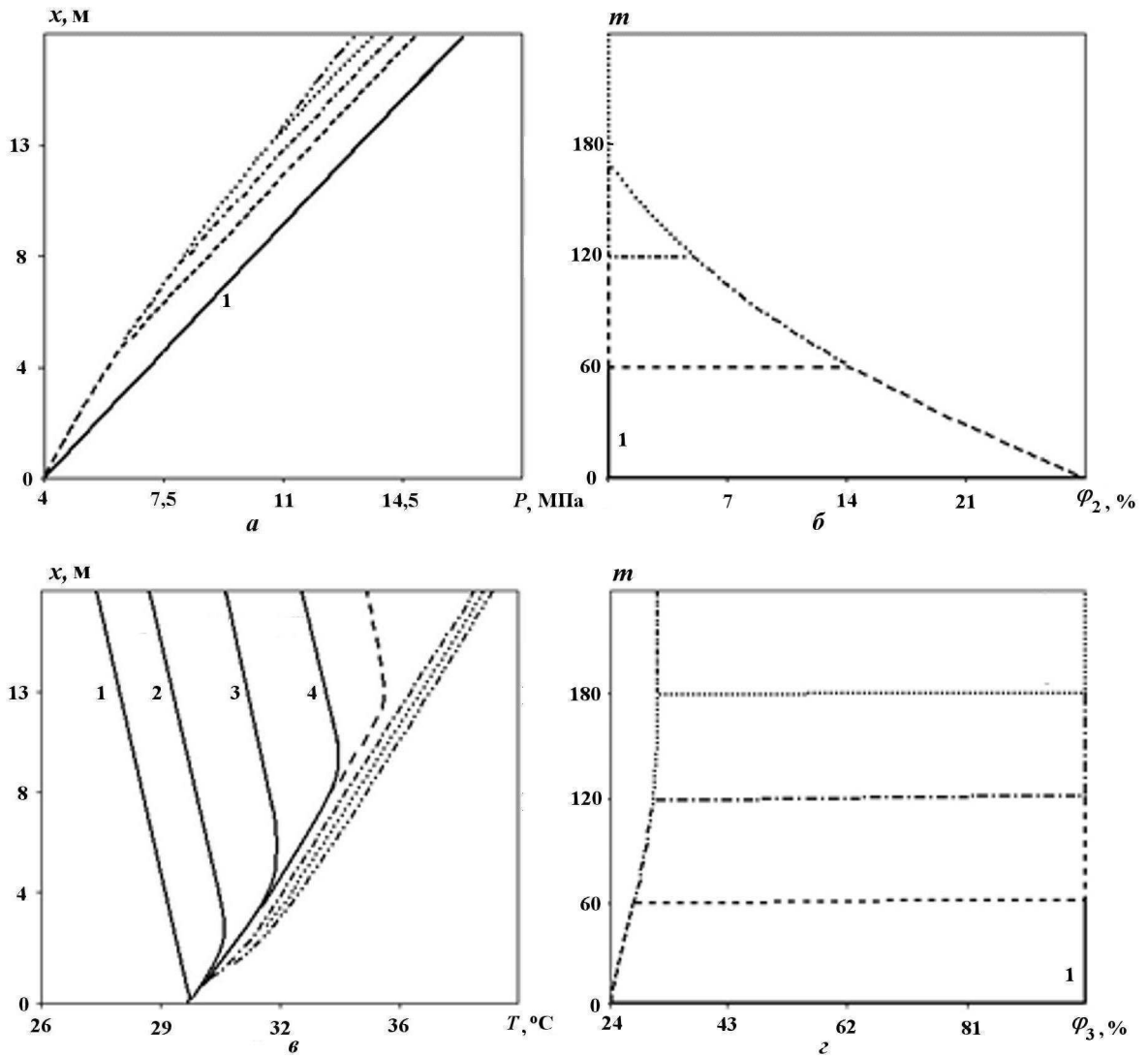


Рис. 2. Распределения давления P (а), газосодержания φ_2 (б), температуры T (в) и водосодержания φ_3 (z) по длине насосного узла на различные моменты времени: 1 — $\tau = 0$; 2 — $\tau = 0,55$ с; 3 — $\tau = 1,25$ с; 4 — $\tau = 1,1$ с; — — — — $\tau = 2,6$ с; — · — — $\tau = 4,5$ с; · · · — $\tau = 6,6$ с; — · · — — $\tau = 8,9$ с

По мере продвижения трехфазной смеси происходит снижение перепада давления, развиваемого насосом, и увеличение температуры в каналах ЭЦН (см. рис. 2, а, в). Это обусловлено тем, что вязкость трехфазной смеси значительно превышает вязкость воды, из-за чего происходит ухудшение работы отдельных ступеней — уменьшение напора $H_{\text{Э}}$, КПД $\eta_{\text{Э}}$ и рост интегральной мощности $N_{\text{Э}}$ насосного узла. В результате температура продукции в насосе возрастает. Кривые 2—4 на рис. 2, в, соответствующие дополнительным моментам времени $\tau = 0,55; 1,25; 2,1$, иллюстрируют нелинейный характер температурной зависимости, обусловленный наличием областей однофазного и трехфазного течений, в которых теплофизические свойства продукции различны. Этим объясняется наличие излома на кривых $T(\tau, x)$. Наиболее интенсивный прогрев имеет место в ступенях, перекачивающих вязкую смесь. К моменту завершения замещения воды смесью зависимость $T(x)$ становится практически линейной.

Положения границы Γ раздела между областями однофазного и трехфазного течений в различные моменты времени видны на графиках распределений всех представленных на рис. 2 функций.

По мере продвижения водонефтегазового потока увеличивается доля ступеней, функционирующих в неблагоприятных условиях, характеризующихся вредным влиянием газа [10] и существенным различием вязкостей и плотностей смеси и воды. Однако с ростом давления в насосном узле происходит снижение газонасыщенности из-за сжатия и растворения газа в нефтяной фазе и, следовательно, снижение влияния данного фактора на работу ступеней. Полное растворение газа происходит при $m \approx 170$.

Следует отметить, что в окрестности границы Γ образуется узкая зона, в которой водонасыщенность изменяется от ее значения в трехфазном потоке ($24 \div 30\%$) до 100% . В этой зоне проявляется эффект инверсии фаз: при $\varphi_3 < 50\%$ несущей фазой является нефть, а при $\varphi_3 \geq 50\%$ — вода. В результате эффективная вязкость μ в этой области меняется скачком.

Рис. 3 демонстрирует изменение интегральных характеристик работы ЭЦН в процессе замещения воды смесью. На рис. 3, а маркеры (рабочие точки) соответствуют значениям мощности $N_{\text{Э}}$, КПД $\eta_{\text{Э}}$ и напора $H_{\text{Э}}$ насосного узла при изменяющихся условиях его работы, когда часть ступеней со стороны входа перекачивает смесь, а остальные ступени — воду. Область, которая соответствует характеристикам установившегося режима работы насоса в окрестности оптимальных подач $0,7Q^* \leq Q \leq 1,3Q^*$, показана на рисунке заштрихованной полосой.

Отметим, что интегральные характеристики насоса $N_{\text{Э}} = N_{\text{вх}}(Q_{\text{вх}})$, $\eta_{\text{Э}} = \eta_{\text{Э}}(Q_{\text{вх}})$, $H_{\text{Э}} = H_{\text{Э}}(Q_{\text{вх}})$ построены для стационарного режима работы ЭЦН при тех же самых условиях на входе. По мере продвижения водонефтегазовой смеси вдоль ступеней ЭЦН рабочие точки постепенно приближаются к этим кривым. После завершения переходного процесса — замещения воды смесью — электронасос ЭЦНМИК5А-600-1150 выходит именно на такой режим работы (см. рис. 3, а). Количественное изменение интегральных характеристик во времени иллюстрирует рис. 3, б. Нетрудно видеть, что за время переходного процесса приращение давления $P_{\text{Э}}$, развиваемого насосом, снижается почти на 40 атмосфер, а его КПД $\eta_{\text{Э}}$ падает более чем на 10% .

Рассмотрим теперь случай, когда на входе в насосный узел при $\tau > 0$ температура, как и в предыдущем примере, постоянна: $T|_{x=0} = T_{\text{вх}} = 30^\circ\text{C}$, а для давления, расхода и водосодержания заданы периодические граничные условия:

$$P|_{x=0} = P_{\text{вх}} + A_P \sin(\Omega\tau); \quad G|_{x=0} = G_{\text{вх}} + A_G \sin(\Omega\tau); \quad \varphi_3|_{x=0} = \max(0, \varphi_{3\text{вх}} + A_{\varphi_3} \sin(\Omega\tau)),$$

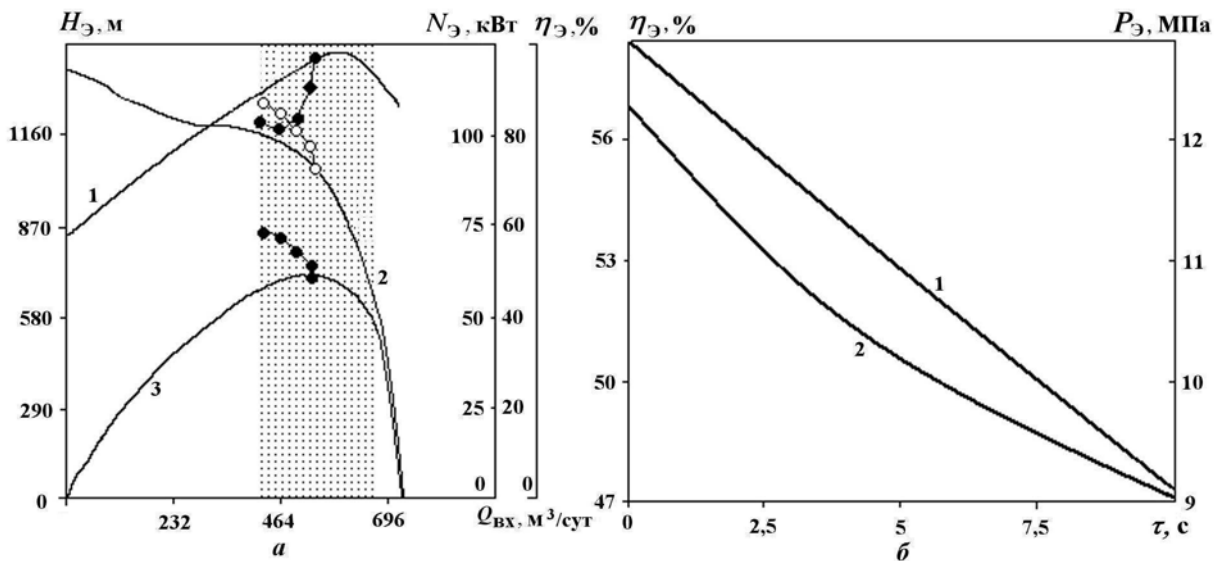


Рис. 3. Изменение режима работы ЭЦН при замещении воды смесью: а — суммарные мощность $N_{\text{Э}}$ (1), напор $H_{\text{Э}}$ (2) и КПД $\eta_{\text{Э}}$ (3) при $\tau = 0; 2,6; 4,5; 6,6; 8,9$ с; б — временные зависимости приращения давления $P_{\text{Э}}$ (1), развиваемого ЭЦН, и КПД $\eta_{\text{Э}}$ (2)

где Ω , A_P , A_G и A_{φ_3} — соответственно частота и амплитуды колебания давления, массового расхода и водонасыщенности.

На рис. 4 представлены результаты расчетов для варианта замещения воды смесью при $P_{вх} = 4$ МПа, $G_{вх} = 5,56$ кг/с, $\varphi_{3вх} = 30\%$, $A_P = -1$, $A_G = 0,04$, $A_{\varphi_3} = 40\%$, $\Omega = 1$. Эти параметры подобраны таким образом, чтобы не происходило срыва подачи насосом при наименьшем значении давления $P|_{x=0} = 3$ МПа, когда газосодержание $\varphi_2|_{x=0}$ на входе в ЭЦН и соответственно объемный расход $G|_{x=0}$ смеси максимальны. Водонасыщенность $\varphi_3|_{x=0}$ изменяется от 0 до 70% и задается таким образом, что в течение некоторого времени в насос поступает газонефтяная смесь, т. е. $\varphi_3|_{x=0} = 0$.

Как показал анализ результатов расчетов, процесс замещения воды смесью носит более сложный, волнообразный характер. С увеличением давления $P|_{x=0}$ протяженность области газожидкостного течения сокращается, а при уменьшении $P|_{x=0}$ — увеличивается, так что в насосном узле возникает подвижная граница раздела между областями газожидкостного и жидкостного течений. Изменение газосодержания по длине насоса влечет за собой и изменение характера водонасыщенности. Временные зависимости интегрального КПД η_{Σ} насоса и развиваемого им приращения давления P_{Σ} отличаются от соответствующих характеристик процесса при постоянных граничных условиях, а полное замещение воды смесью более длительное (~ 15 с). После его завершения насос выходит на периодический режим работы (см. рис. 4). При этом на каждом периоде функции P_{Σ} и η_{Σ} имеют различное количество локальных экстремумов.

Аналогичные расчеты были проведены для других типов ступеней и при различных значениях граничных функций на входе в ЭЦН. На основе анализа их результатов сделаны следующие выводы:

1. Время замещения воды трехфазной смесью определяется конструктивными параметрами ступеней насосного узла, их количеством, расходом трехфазной смеси, ее составом и свойствами ее фаз (вязкостью, плотностью, давлением насыщения нефти газом и т. д.). Эти характеристики определяют также степень нагрева смеси в каналах ЭЦН.
2. Этап замещения воды смесью при периодическом характере граничных функций сопровождается перераспределением газо- и водонасыщенности по ступеням ЭЦН. По сравнению с постоянными граничными условиями полное замещение воды смесью происходит за больший промежуток времени.
3. Во время переходного процесса мощность, потребляемая ЭЦН и равная полезной мощности на валу ПЭД, непрерывно меняется, причем двигатель работает с повышенной нагрузкой. При контроле работы УЭЦН с помощью наземной СУ задаваемые в ее контроллере допустимые временные интервалы эксплуатации ПЭД в экстремальных режимах, по истечении которых срабатывает отключение двигателя, сравнимы с продолжительностью процесса замещения воды смесью. Это следует учитывать при моделировании процесса вывода скважины, оборудованной ЭЦН, на рабочий режим.

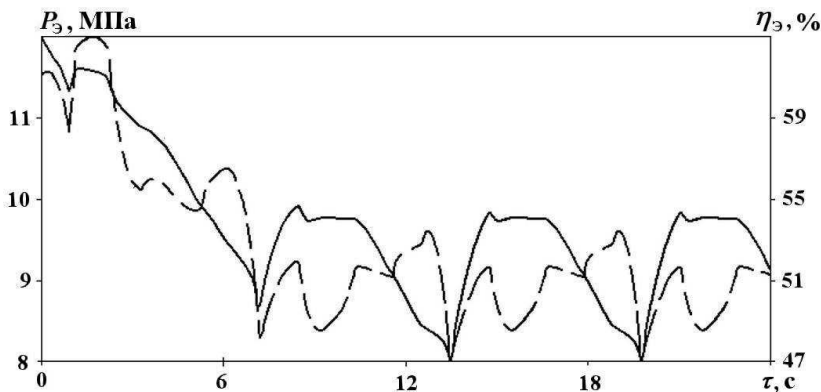


Рис. 4. Динамика изменения давления P_{Σ} (—), развиваемого насосом, и КПД η_{Σ} (---) при периодических граничных условиях на входе в ЭЦН ($x = 0$)

Список литературы

1. Технологический регламент ОАО "САМАРАНЕФТЕГАЗ" по эксплуатации УЭЦН. Версия 4.0. Самара, 2007.
2. *Ляпков П. Д., Игревский В. И., Станчу И.* О дисперсности двухфазных сред в рабочих органах погружных центробежных насосов. М., 1975. Деп. во ВНИИОЭНГ 10.06.76, № 245—75.
3. *Нигматулин Р. И.* Динамика многофазных сред. Ч. I. М.: Наука, 1987.
4. *Пудовкин М. А., Саламатин А. Н., Чугунов В. А.* Температурные процессы в действующих скважинах. Казань: Изд-во КГУ, 1977.
5. *Саламатин А. Н.* Математические модели дисперсных потоков. Казань: Изд-во КГУ, 1987.
6. *Конюхов В. М.* Дисперсные потоки в нефтяных скважинах. Казань: Изд-во КГУ, 1990.
7. *Ляпков П. Д., Игревский В. И.* О массообмене в погружном центробежном насосе // Нефтепромышленное дело. 1976. № 2. С. 3—7.
8. *Ляпков П. Д.* Подбор установки погружного центробежного насоса // Справочное руководство по проектированию разработки и эксплуатации нефтяных месторождений. Добыча нефти / Под ред. Ш. К. Гиматудинова. М.: Недра, 1983. С. 237—293.
9. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
10. *Ляпков П. Д., Игревский В. И., Дроздов А. Н.* Исследование работы погружного центробежного насоса на смеси вода-газ // Нефтепромышленное дело. 1982. №4. С. 19—21.

Статья поступила в редакцию 14.12.11.

УДК 004(06)+621.38(06)+681.5(06)

ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК МИКРООБЪЕМОВ ЭЛЕМЕНТОВ СБИС НА ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЕ ОТ ПРОТОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

А. В. Афонин, Л. А. Гришанцева, В. А. Полуниин, А. И. Чумаков
(5494 МО РФ, НИЯУ МИФИ, ЭНПО "СПЭЛС", г. Москва)

Проведено численное моделирование по программе GEANT4 процессов энерговыделения от воздействия протонов в микрообъемах активных элементов СБИС разной формы с учетом влияния окружающих материалов. Показано, что при микронных размерах чувствительных областей СБИС форма микрообъема оказывает на энерговыделение слабое влияние.

Ключевые слова: протонное излучение, интегральная схема, энерговыделение, эффект собирания заряда, программа GEANT4.

Развитие современных микроэлектронных устройств определяется все большей их миниатюризацией, сопровождаемой значительным уменьшением активных областей элементов сверхбольших интегральных схем (СБИС). Широкое использование СБИС в электронной аппаратуре космических аппаратов приводит к необходимости учета влияния локальных радиационных эффектов, обусловленных значительным энерговыделением от взаимодействия отдельной ядерной частицы с веществом СБИС [1, 2]. Миниатюризация отдельных элементов СБИС (определяемая проектными нормами) уменьшает как эффективный объем элемента СБИС, так и пороговую энергию возникновения локального радиационного эффекта. В связи с этим совершенно не очевидно, что по мере уменьшения размеров элементов чувствительность СБИС к локальным радиационным эффектам при воздействии отдельных ядерных частиц будет возрастать. Такое предположение в первую очередь необходимо проверить применительно к эффектам, вызываемым вторичными ядерными частицами (протонами), так как вероятность возникновения эффекта от них пропорциональна объему активного элемента, а не поверхности, как при воздействии тяжелых заряженных частиц.

Решение данной задачи в работе производилось численным моделированием по програм-

ме GEANT4 [3, 4] процессов энерговыделения в микрообъемах разных размеров и форм при воздействии потока высокоэнергетичных частиц (протонов). Прохождение протонов больших энергий через вещество сопровождается формированием вторичных ядерных частиц, имеющих большой разброс по массе, энергии и линейным потерям энергии. Из-за конечного пробега вторичных ядерных частиц при расчете вероятности локального энерговыделения возникает необходимость учета вклада частиц, генерированных за пределами активной области СБИС.

В качестве типовых объектов были выбраны: 1) куб с размерами $3 \times 3 \times 3$ мкм; 2) сфера диаметром 3 мкм; 3) цилиндр диаметром и высотой, равными 3 мкм. Моделирование проводилось для протонов с энергиями в диапазоне от 15 до 1000 МэВ для активного элемента, находящегося в типичной среде окружения СБИС. Источник излучения задавался изотропным потоком частиц.

На рис. 1 представлен пример моделируемой структуры для кубического элемента с учетом реального окружения материалами, характерными для элементов СБИС.

По результатам численного моделирования формировались файлы, которые содержали следующую информацию:

– суммарные потери энергии вторичных частиц, образованных в микрообъеме (prob1);

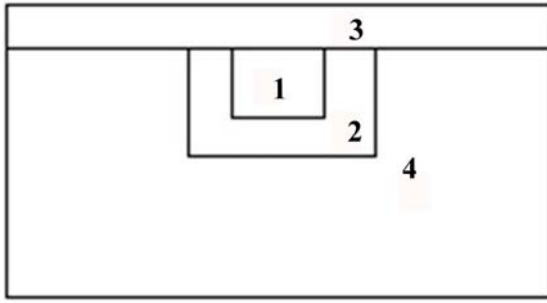


Рис. 1. Взаимное расположение и размеры элементов анализируемого микрообъема: 1 — область активного элемента СБИС; 2 — слой кремния; 3 — слой окиси кремния размерами $0,2 \times 0,2 \times 0,013$ мм; 4 — подложка СБИС

- суммарные потери энергии всех вторичных частиц в микрообъеме (prob2);
- суммарные потери энергии в микрообъеме (prob3);
- энергии и пробеги ядер отдачи в микрообъеме;
- суммарные потери энергии в неупругих процессах в микрообъеме;
- суммарные ионизационные потери энергии и пробеги для каждой вторичной ядерной частицы в микрообъеме.

На рис. 2, 3 представлены результаты расчетов вероятности потерь энергии в активной области различной формы при облучении протонами с энергией 100 МэВ.

Видно, что вероятности потерь энергии $\Delta E < 0,2$ МэВ не отличаются друг от друга для всех трех форм активной области. Это обусловлено тем, что основной канал энерговыделения определяется потерями короткопробежных вторичных частиц, образованных внутри активной области.

Вероятности энерговыделения $\Delta E > 0,2$ МэВ близки по порядку значений для всех трех форм активной области, однако конкретные значения варьируются в зависимости от характеристик самой области. При этом надо иметь в виду, что для энерговыделения больше нескольких мегаэлектронвольт статистика взаимодействий оказывается крайне малой, что не позволяет делать статистически значимых выводов. Поэтому для большинства приложений можно считать, что форма активной области не сказывается на вероятности энерговыделения для областей с 3-микронными размерами.

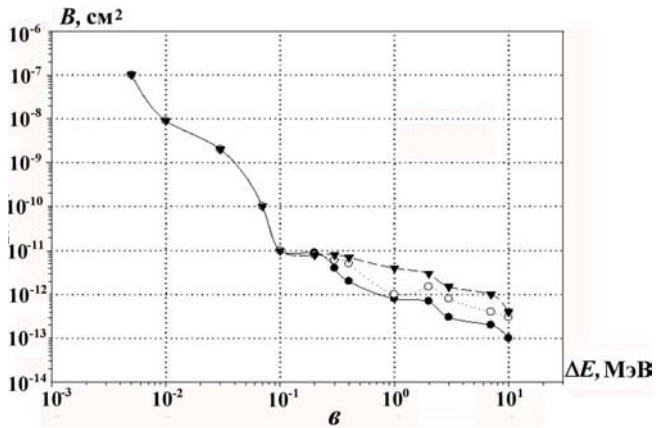
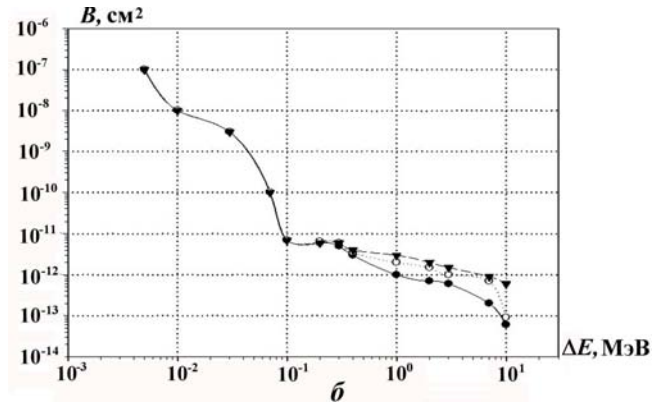
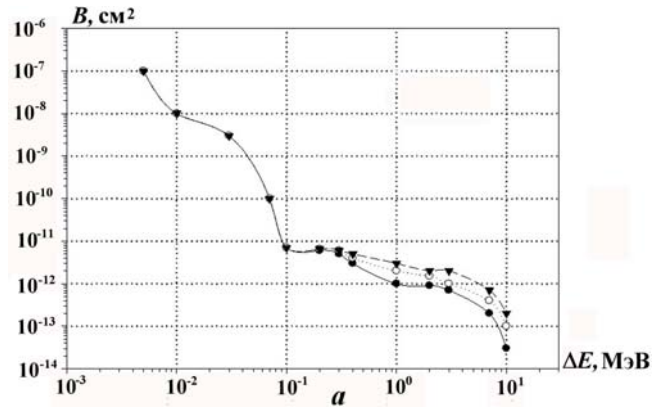


Рис. 2. Вероятность энерговыделения, нормированная на флюенс протонов с энергией 100 МэВ, для различных форм активной области: а — кубической; б — сферической; в — цилиндрической; —●— — prob1; ...○... — prob2; —▼— — prob3

На рис. 4 приведены результаты расчетов интегральных зависимостей вероятности энерговыделения от энергии первичной частицы для активной области сферической формы. В целом результаты вполне очевидны: по мере увеличения энергии протонов происходит выход на насыщение по вероятности энерговыделения, что

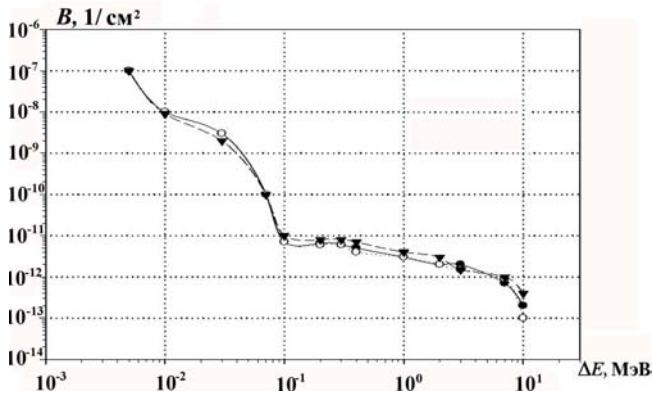


Рис. 3. Сравнение вероятностей энерговыделения, нормированных на флюенс протонов с энергией 100 МэВ, для различных форм области: —●— куб; ...○... — сфера; —▼— цилиндр

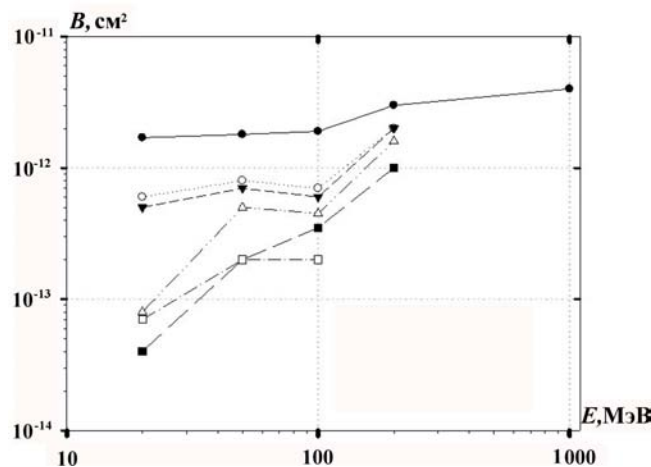


Рис. 4. Вероятность энерговыделения, нормированная на флюенс протонов, в активном элементе СБИС (сфера) в зависимости от энергии протона при анализе процессов только в исследуемой области: —●— $\Delta E > 0,5$ МэВ; ...○... — $\Delta E > 1$ МэВ; - -▼- - - $\Delta E > 1,5$ МэВ; - · - ·△· - - $\Delta E > 2$ МэВ; - -■- - - $\Delta E > 3$ МэВ; - · - □· - - $\Delta E > 7$ МэВ

соответствует типовым зависимостям сечений эффектов от энергии протонов [1, 2]. Практически полное совпадение полученных результатов также наблюдалось и для элемента кубической формы.

Из сравнения графиков на рис. 4 и 5 видно, что учет процессов во внешних окружающих областях приводит к увеличению вероятности энерговыделения почти в 3 раза. При этом происходит пропадание "чувствительности" результатов расчетов к форме активной области электронно-

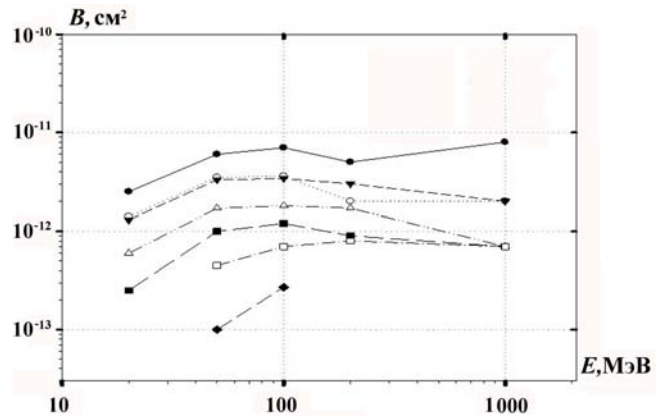


Рис. 5. Вероятность энерговыделения, нормированная на флюенс протонов, в активном элементе СБИС в зависимости от энергии протона при анализе процессов как в исследуемой, так и в окружающих областях: —●— $\Delta E > 0,5$ МэВ; ...○... — $\Delta E > 1$ МэВ; - -▼- - - $\Delta E > 1,5$ МэВ; - · - ·△· - - $\Delta E > 2$ МэВ; - -■- - - $\Delta E > 3$ МэВ; - · - □· - - $\Delta E > 7$ МэВ; - -◆- - $\Delta E > 10$ МэВ

го элемента. Аналогичные результаты были получены и при моделировании активных областей с другими размерами.

Таким образом, результаты расчетного моделирования для областей с типовыми размерами около 3 мкм приводят к следующим выводам:

- максимальное энерговыделение в микрообъеме относительно слабо зависит от условий сбора заряда (наличия или отсутствия дополнительной области сбора);
- при значениях энерговыделения менее 0,1 МэВ, которые обусловлены прямыми ионизационными потерями, учет частиц из внешних окружающих областей не приводит к изменению энерговыделения;
- при значениях энерговыделения более 0,1 МэВ учет частиц, образующихся за пределами "чувствительной" области, увеличивает вероятность энерговыделения почти в 3 раза;
- при энергиях протона более 50 МэВ значение максимального энерговыделения остается практически неизменным.

Список литературы

1. Чумаков А. И. Действие космической радиации на интегральные схемы. М.: Радио и связь, 2004. С. 320—335.

2. *Чумаков А. И.* Радиационные эффекты в ИС от отдельных ядерных частиц // Модель космоса. В 2 т. Т. 2: Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов / Под ред. М. И. Панасюка, Л. С. Новикова. М.: КДУ, 2007. С. 494—518.
3. *Amako K., Apostoilakis J., Arango H., Dubois P. A. et al.* GEANT4 developments and application // IEEE Transactions on NS. 2006. Vol. 53, No. 1. P. 270—278.
4. *Agostinelli S., Allison J., Amako K., Apostoilakis J. et al.* GEANT4 — a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods. A. 2003. Vol. 506. P. 250—303.

Статья поступила в редакцию 06.03.12.

ПЕРЕЧЕНЬ

статей, опубликованных в 2012 г. в научно-техническом сборнике "Вопросы атомной науки и техники". Сер. "Математическое моделирование физических процессов"

Стенин А. М. Явная полностью консервативная вариационная разностная схема для решения системы уравнений газовой динамики в переменных Лагранжа. Вып. 1. С. 3–16.

Модестов Д. Г. Интегрирование уравнений эволюции ядерного состава вещества в постоянных радиационных полях. Вып. 1. С. 17–28.

Кульментьев А. И. Алгоритм детектирования на атомном уровне вакансионной поры и описания ее формы. Вып. 1. С. 29–42.

Воронин Б. Л., Здорова М. В., Копкин С. В., Ветчинников М. В., Давыдов И. А., Пронин Е. А. Моделирование методом кластерной динамики высокоскоростного осколочного воздействия на многослойные преграды. Вып. 1. С. 43–51.

Рыбкин А. С., Залялов А. Н., Малькин А. Г., Огнев С. П., Рослов В. И., Семёнов И. В. Программный комплекс на базе гибридных вычислительных систем для расчета критических параметров методом Монте-Карло. Вып. 1. С. 52–58.

Крючков И. А., Копкин С. В. Программный комплекс моделирования методом молекулярной динамики для гибридных вычислительных систем. Вып. 1. С. 59–65.

Ферцев А. А. Практическая реализация распознавания образа предмета с помощью нейронных сетей. Вып. 1. С. 66–75.

Чернышев Ю. Д., Одинцова М. А., Муругова О. О. Алгоритмы сглаживания возмущений поля скоростей применительно к расчетам по методике Д. Вып. 2. С. 3–15.

Бобровский Д. И., Большаков И. В., Разин А. Н. О сходимости разностного решения уравнений турбулентного перемешивания при взаимодействии зоны перемешивания с ударной волной. Вып. 2. С. 16–24.

Глушак Б. Л., Игнатова О. Н., Надёжин С. С., Раевский В. А. Релаксационная модель сдвиговой прочности пяти металлов (алюминий, бериллий, медь, тантал, уран). Вып. 2. С. 25–36.

Субботин А. Н. К доказательству эквивалентности линейного интегродифференциального кинетического уравнения Больцмана и интегрального транспортного уравнения типа уравнения Пайерлса. Вып. 2. С. 37–50.

Карлыханов Н. Г., Селиванова Н. В. Об одном алгоритме склейки кинетического уравнения с P_1 -приближением уравнения переноса излучения. Вып. 2. С. 51–63.

Бабанов А. В., Бельков С. А., Бондаренко С. В., Ватулин В. В., Винокуров О. А., Гречишкина И. Н., Змушко В. В., Измайло-

ва Т. Б., Митрофанов Е. И., Рябикина Н. А., Шамраев Б. Н. Методика МИМОЗА-НДЗД. Расчет трехмерных задач спектрального переноса излучения. Вып. 2. С. 64—72.

Светухин В. В., Кадочкин А. С., Рисованный В. Д. Одномерная модель протекания гелия в поглощающих элементах реакторов ВВЭР. Вып. 2. С. 73—77.

Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г., Варгин А. М., Вялухин В. М., Дмитриев Н. А., Жуков Д. А., Игрунов В. И., Корзаков Ю. Н., Кошелев В. В., Лапшинов В. Н., Логвин Ю. В., Петрик А. Н., Селякин А. Г., Семёнов Г. П., Стрюков В. Н., Ушаков А. Ю., Чайка А. И., Черных С. О., Шагалиев Р. М., Шатохин А. В., Шлыков С. Н., Шмаков Е. Л., Ярулин Д. Р. Универсальная компактная суперЭВМ. Вып. 2. С. 78—89.

Янилкин Ю. В., Шмелёв В. А., Колобянин В. Ю., Беляев С. П. Монотонный метод частиц для моделирования двумерных газодинамических течений. Вып. 3. С. 3—14.

Бартенев Ю. Г., Бондаренко Ю. А., Спиридонов В. Ф. Прогноз параметров подсистем вычислительной системы эксафлопсного класса. Вып. 3. С. 15—23.

Воропинов А. А., Новиков И. Г., Соколов С. С. Методы мелкозернистого распараллеливания в методике ТИМ-2D. Вып. 3. С. 24—33.

Конюхов В. М., Конюхов И. В., Краснов С. В. Математическое обеспечение программно-технического комплекса ИСКЕНДЕР. Вып. 3. С. 34—44.

Ганина С. М., Гинкин В. П., Буденкова О. Н., Саади Б., Ашани Л., Фотрель И. Моделирование кристаллизации бинарных расплавов на примерах численного и экспериментального бенчмарков. Вып. 3. С. 45—56.

Байков Э. Г., Дерюгин Ю. Н., Лёвкин С. А., Устинов С. М., Холостов А. А. Численное моделирование конструкции серверного шкафа с насадкой, равномерно распределяющей входной охлаждающий поток. Вып. 3. С. 57—63.

Басалов В. Г., Вялухин В. М. Адаптивная система маршрутизации для отечественной системы межпроцессорных обменов СМПО-10G. Вып. 3. С. 64—70.

Белозёрова А. Р. Регулярные выражения в расчетах ядерной трансмутации. Вып. 3. С. 71—78.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|----|
| <i>Козырев О. М., Литвинов В. П.</i> Метод полиномиальной аппроксимации оператора шага уравнения теплопроводности | 3 |
| <i>Соколов С. С.</i> Феноменологическая модель кинетики развития поврежденности в твердых материалах при импульсных воздействиях | 13 |
| <i>Дерюгин Ю. Н., Выскубенко Б. А., Зеленский Д. К., Ильин С. П., Колобянин Ю. В., Кудряшов Е. А.</i> Численное исследование энергетических характеристик сверхзвукового химического кислород-йодного лазера с различными вариантами смешения потоков | 27 |
| <i>Рябинин В. К.</i> Оценка эффективности программ решения жестких систем дифференциальных уравнений применительно к задачам физики горения | 39 |
| <i>Андрянов А. А., Коровин Ю. А., Купцов И. С., Наталенко А. А.</i> Системы компьютерного моделирования высокоэнергетических ядерных реакций и подготовки активационных ядерных данных | 48 |
| <i>Конюхов В. М., Конюхов И. В.</i> Численное моделирование нестационарных процессов тепломассопереноса при движении газодонефтяной смеси в каналах центробежного электронасоса | 60 |
| <i>Афонин А. В., Гришанцева Л. А., Полунин В. А., Чумаков А. И.</i> Влияние характеристик микрообъемов элементов СБИС на энерговыделение от протонного воздействия | 70 |
| Перечень статей, опубликованных в 2012 г. в научно-техническом сборнике "Вопросы атомной науки и техники". Сер. "Математическое моделирование физических процессов" | 74 |

CONTENTS

| | |
|---|----|
| <i>Kozyrev O. M., Litvinov V. P.</i> A polynomial approximation method for the step operator of the heat conductivity equation | 3 |
| <i>S. S. Sokolov</i> A penomenological model of the damage evolution kinetics in solids under pulse impacts | 13 |
| <i>Deryugin Yu. N., Vyskubenko B. A., Zelen-sky D. K., Il'yin S. P., Kolobyanin Yu. V., Kudryashov E. A.</i> Numerical study of energetic parameters of a supersonic chemical oxygen-iodine laser with flow mixing variations | 27 |
| <i>Ryabinin V. K.</i> Estimation of the efficiency of codes for stiff differential equation systems in problems of combustion physics | 39 |
| <i>Andrianov A. A., Korovin Yu. A., Kuptsov I. S., Natalenko A. A.</i> Systems for computer simulation of high-energy nuclear reactions and preparations of activation nuclear data | 48 |
| <i>Konyukhov V. M., Konyukhov I. V.</i> Numerical simulation of unsteady-state heat-and-mass transport processes in a gas-water-oil mixture moving through the centrifugal electrical pump passage | 60 |
| <i>Afonin A. V., Grishantseva L. A., Polunin V. A., Chumakov A. I.</i> The effect of microvolume parameters of VLSI circuit components on the energy output due to the impact of photons | 70 |
| The list of papers published in the sci-tech collected edition "Voprosy atomnoi nauki i tekhniki". Ser. "Matem. Model. Fiz. Proc." during 2012 | 74 |

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Н. П. Мишкина,
Е. Н. Старченко

Корректоры В. В. Барышникова,
А. В. Федоренко

| | |
|------------------------------------|------------------|
| Подписано в печать 02.11.12 | Формат 60×84/8 |
| Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 10 | Уч.-изд. л. ~ 12 |
| Тираж 1000 экз. Зак. тип. 7 статей | Индекс 3642 |

Оригинал-макет подготовлен в Математическом отделении
Всероссийского научно-исследовательского института
экспериментальной физики

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188, г. Саров Нижегородской обл.

УДК 519.63

МЕТОД ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ ОПЕРАТОРА ШАГА УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ / О. М. Козырев, В. П. Литвинов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 4. С. 3–12.

В работе предлагается метод численного решения краевых задач уравнения теплопроводности. Метод основан на конструировании разностного оператора шага в виде операторного полинома. Конструирование операторного полинома происходит в пространстве фурье-образов с использованием многочленов Чебышева и Ланцоша. Алгоритм решения представляет собой явные пошаговые вычисления и реализован в виде схемы *предиктор-корректор*. Метод прост в реализации и поддается эффективному распараллеливанию. Изложение метода дается на примере решения задачи Коши для линейного уравнения теплопроводности. Представлены результаты численных решений известных тестовых задач (рис. 7, табл. 7, список лит. — 13 назв.).

Ключевые слова: уравнение теплопроводности, фурье-образ, полиномы Чебышева и Ланцоша.

УДК 519.6

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ РАЗВИТИЯ ПОВРЕЖДЕННОСТИ В ТВЕРДЫХ МАТЕРИАЛАХ ПРИ ИМПУЛЬСНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ / С. С. Соколов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 4. С. 13–26.

Представлена феноменологическая модель кинетики зарождения, развития и уменьшения поврежденности в твердых материалах под действием импульсных нагрузок и компактирования разрушенных материалов под действием сил сжатия. При построении модели был использован континуально-кинетический подход, в рамках которого разрушение моделируется как процесс накопления повреждений под действием растягивающих напряжений и из-за сдвиговых деформаций. Приводятся результаты численного моделирования разрушения клиновидных урановых образцов и плоского алюминиевого образца и дается их сравнение с экспериментальными данными (рис. 5, табл. 2, список лит. — 20 назв.).

Ключевые слова: феноменологическая модель, зарождение и развитие поврежденности, разрушение из-за сдвиговых деформаций и растягивающих напряжений, компактирование, валидационные расчеты.

УДК 621.375.826

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СВЕРХЗВУКОВОГО ХИМИЧЕСКОГО КИСЛОРОД-ЙОДНОГО ЛАЗЕРА С РАЗЛИЧНЫМИ ВАРИАНТАМИ СМЕШЕНИЯ ПОТОКОВ / Ю. Н. Дерюгин, Б. А. Выскубенко, Д. К. Зеленский, С. П. Ильин, Ю. В. Колобянин, Е. А. Кудряшов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 4. С. 27–38.

Приводится математическая модель и трехмерная расчетная методика для исследования структуры неравновесных потоков и определения энергетических характеристик химического кислород-йодного лазера. Математическая модель включает в себя основные кинетические процессы в активной среде лазера и процессы генерации лазерного излучения как в устойчивом, так и неустойчивом резонаторе. *Трехмерная* расчетная методика основана на решении как полных, так и параболических уравнений Навье—Стокса и позволяет описывать неравновесные течения до- и сверхзвуковых потоков (в том числе в области резонатора), смешение сверхзвуковых потоков и определять энергетические характеристики лазера.

Численно исследованы энергетические характеристики сверхзвукового кислород-йодного лазера со смешевыми устройствами различного типа. Для каждого типа смешевого устройства определены оптимальные условия по геометрии и составу инжектируемого газа, при которых реализуются максимальные энергетические характеристики лазера. Показано, что все рассмотренные конфигурации смешевых устройств применимы и позволяют получить достаточно высокие энергетические характеристики лазера. Максимальные характеристики получены для соплового блока с трехрядным трубчатым инжектором: мощность излучения ≈ 99 кВт, удельный энергопотребление 300 Дж/г, химическая эффективность 35 %, что хорошо согласуется с достигнутыми экспериментальными результатами (рис. 12, табл. 6, список лит. — 11 назв.).

Ключевые слова: химический кислород-йодный лазер, математическая модель, расчетная методика, характеристики генерации излучения, химическая эффективность.

УДК 519.6:544.45

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОГРАММ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ЗАДАЧАМ ФИЗИКИ ГОРЕНИЯ / В. К. Рябинин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 4. С. 39–47.

Исследована эффективность применения трех программ — интеграторов систем обыкновенных дифференциальных уравнений с высокой степенью математической жесткости. Такие уравнения возникают при описании кинетики разветвленно-цепных реакций, свойственных для процессов горения и взрывного превращения. Тестирование программ-интеграторов выполнено на примере трех модельных задач, характерных для физики горения газов (рис. 7, табл. 3, список лит. — 15 назв.).

Ключевые слова: математическое моделирование, горение, химическая кинетика, жесткие дифференциальные уравнения, тестирование программного обеспечения.

УДК 539.17

СИСТЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ И ПОДГОТОВКИ АКТИВАЦИОННЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ / А. А. Андрианов, Ю. А. Коровин, И. С. Купцов, А. А. Наталенко // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 4. С. 48–59.

Дается описание разработанных авторами интегрированных программных систем IViS SMP1 и InIS HAND, предназначенных для повышения эффективности фундаментальных и прикладных исследований в области константного обеспечения расчетов перспективных ядерно-энергетических установок. Описывается алгоритм получения оцененных ядерно-физических данных с использованием разработанного программного обеспечения, основанный на современных методах теории принятия решений при многих критериях (рис. 7, табл. 7, список лит. — 16 назв.).

Ключевые слова: модели высокоэнергетических ядерных реакций, программные комплексы, интерактивные среды, методы многокритериальной теории принятия решений, факторный анализ, оцененные ядерно-физические данные.

УДК 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ПРИ ДВИЖЕНИИ ГАЗОВОДОНЕФТЯНОЙ СМЕСИ В КАНАЛАХ ЦЕНТРОБЕЖНОГО ЭЛЕКТРОНАСОСА / В. М. Конюхов, И. В. Конюхов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 4. С. 60–69.

Построена математическая модель переходных термогидродинамических процессов в погружном многоступенчатом электроцентробежном насосе при замещении воды трехфазной смесью на этапе вывода нефтяной добывающей скважины на эксплуатационный режим. Разработаны численная модель и соответствующий программный комплекс. На основе вычислительных экспериментов изучены особенности замещения воды водонефтегазовой смесью в каналах насосного узла и изменение рабочих характеристик ступеней насоса (рис. 4, список лит. — 10 назв.).

Ключевые слова: численное моделирование, переходные процессы, тепломассоперенос, многофазные потоки, электроцентробежный насос.

УДК 004(06)+621.38(06)+681.5(06)

ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК МИКРООБЪЕМОВ ЭЛЕМЕНТОВ СБИС НА ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЕ ОТ ПРОТОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ / А. В. Афонин, Л. А. Гришанцева, В. А. Полунин, А. И. Чумаков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 4. С. 70—73.

Уменьшение активных размеров элементов интегральных схем увеличивает их чувствительность к локальным радиационным эффектам, вызванным воздействием ядерных частиц. В настоящей работе проводилось численное моделирование по программе GEANT4 процессов энерговыделения при воздействии протонов с энергиями $15 \div 1000$ МэВ в элементах СБИС разных размеров и форм, находящихся в типичной среде окружения. Полученные результаты для микронных размеров "чувствительных" областей свидетельствуют, что максимальное энерговыделение в микрообъеме слабо зависит от условий собирания заряда, учет частиц, образующихся за пределами чувствительного объема, увеличивает вероятность энерговыделения почти в 3 раза, а при энергиях протона более 50 МэВ максимальное энерговыделение остается практически неизменным (рис. 5, список лит. — 4 назв.).

Ключевые слова: протонное излучение, интегральная схема, энерговыделение, эффект собирания заряда, программа GEANT4.

A POLINOMIAL APPROXIMATION METHOD FOR THE STEP OPERATOR OF THE HEAT CONDUCTIVITY EQUATION / O. M. Kozyrev, V. P. Litvinov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2012. No 4. P. 3—12.

Given here is for solving the boundary-value problems of the heat conductivity equation. The method is based on constructing a difference step operator in the form of an operator polynomial. The operator polynomial is constructed in the space of Fourier images using Chebyshev and Lanczos polynomials. The solution algorithm represents explicit stepwise calculations and is implemented in the form of *predictor-corrector* scheme. The method is easy to implement and can be efficiently parallelized. The method is described by the example of Cauchy problem for the linear heat conductivity equation. Results of numerical solutions for some well-known test problems are presented.

Key words: heat conductivity equation, Fourier image, Chebyshev and Lanczos polynomial.

A PHENOMENOLOGICAL MODEL OF THE DAMAGE EVOLUTION KINETICS IN SOLIDS UNDER PULSE IMPACTS / S. S. Sokolov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2012. No 4. P. 13—26.

A phenomenological model of kinetics describing the origination and evolution of damages in solid materials under the effect of pulse loadings and compaction of fractured materials under the effect of compression forces is presented. A continual-kinetic approach was used to construct the model, in which fracturing is simulated as the process of accumulating damages under the effect of tensile stresses and shear strains. Results of the numerical simulation of fracture in wedge-like uranium samples and a flat aluminum sample are given along with comparison between the calculated results and experimental data.

Key words: phenomenological model, origination and evolution of damages, fracture due to shear strains and tensile stresses, compacting, validation simulations.

NUMERICAL STUDY OF ENERGETIC PARAMETERS OF A SUPERSONIC CHEMICAL OXYGEN-IODINE LASER WITH FLOW MIXING VARIATIONS / Yu. N. Deryugin, B. A. Vyskubenko, D. K. Zelenskiy, S. P. Il'in, Yu. V. Kolobyanin, E. A. Kudryashov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2012. No 4. P. 27–38.

The paper presents a mathematical model and a 3D computational technique for studying the structure of non-equilibrium flows and determining the energy characteristics of a chemical oxygen-iodine laser. The mathematical model includes the main kinetic processes in an active medium of the laser and the processes of generating laser radiation both in stable and unstable resonators. A 3D computational technique is based on solving both complete and parabolic Navier-Stokes equations and allows describing non-equilibrium fluxes of subsonic and supersonic flows (including those in the resonator area), and supersonic flow mixing, as well as determining the energy parameters of the laser.

The energy parameters of a supersonic oxygen-iodine laser with mixing devices of various types have been studied numerically. For each type of mixing device, there have been identified optimum conditions with respect to geometry and composition of the injected gas under which maximum values of the laser energy parameters can be implemented. It is demonstrated that all the studied configurations of mixing devices are acceptable and allow achieving high enough energy parameters of the laser. Maximum values of parameters — radiation power ≈ 99 kW, specific energy rejection 300 J/g, chemical efficiency 35% — have been achieved for a nozzle unit with a three-row tube injector and this result is in a good agreement with the achieved results of experiments.

Key words: chemical oxygen-iodine laser, mathematical model, computational technique, radiation generation parameters, chemical efficiency.

ESTIMATION OF THE EFFICIENCY OF CODES FOR STIFF DIFFERENTIAL EQUATION SYSTEMS IN PROBLEMS OF COMBUSTION PHYSICS / V. K. Ryabinin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2012. No 4. P. 39–47.

The efficiency of three codes, which are the integrators of ordinary differential equation systems of a high degree of mathematical stiffness, has been studied. Such equations occur during the description of kinetics of branched chain reactions typical for the combustion processes and explosive transformations. The integrators have been tested by the example of three model problems, which are specific to the gaseous combustion physics.

Key words: mathematical simulation, combustion, chemical kinetics, stiff differential equations, software testing.

SYSTEMS FOR COMPUTER SIMULATION OF HIGH-ENERGY NUCLEAR REACTIONS AND PREPARATION OF ACTIVATION NUCLEAR DATA / A. A. Andrianov, Yu. A. Korovin, I. S. Kuptsov, A. A. Natalenko // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2012. No 4. P. 48–59.

The paper describes integrated software systems IViS SMPI and InIS HAND developed by the authors to improve the effectiveness of fundamental and application studies in the field of constant supply for the simulation of advanced nuclear power reactors. The algorithm of acquiring nucleophysical data using the developed software, which is based on the advanced methods of the multiple-criteria decision-making theory, is described.

Key words: models of high-energy nuclear reactions, software systems, interactive media, methods of multiple-criteria decision-making theory, factorial analysis, estimated nucleophysical data.

NUMERICAL SIMULATION OF UNSTEADY-STATE HEAT-AND-MASS TRANSPORT PROCESSES IN A GAS-WATER-OIL MIXTURE MOOVING THROUGH THE CENTRIFUGAL ELECTRICAL PUMP PASSAGE / V. M. Konyukhov, I. V. Konyukhov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2012. No 4. P. 60–69.

A mathematical model of transient thermohydrodynamic processes taking place in a multiple-stage immersion centrifugal electrical pump during the replacement of water by a three-phase mixture in the stage of putting a production oil well into operation has been constructed. A numerical model and a corresponding software complex have been developed. The specific features of water replacement by a water-oil-gas mixture in the pump passages and variations in the performance characteristics of the pump stages have been studied on the base of computational experiments.

Key words: mathematical support, software complex, numerical simulation, multiphase fluxes, oil stratum, producing well, centrifugal electrical pump, data bank.

THE EFFECT OF MICROVOLUME PARAMETERS OF VLSI CIRCUIT COMPONENTS ON THE ENERGY OUTPUT DUE TO THE IMPACT OF PROTONS / A. V. Afonin, L. A. Grishantseva, V. A. Polunin, A. I. Chumakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2012. No 4. P. 70–73.

Reduction of active dimensions of components in integrated circuits leads to a higher sensitivity to local radiation effects caused by nuclear particles. The paper describes efforts on the numerical simulation by GEANT4 code of the energy output processes under the effect of $15 \div 1\,000$ MeV protons in VLSI circuit components with a variety of their shapes and scales in the standard environment. The results obtained for sensitive areas of micron scales demonstrate that the energy output maximum in a microvolume weakly depends on the charge accumulation conditions; account for particles generated outside the sensitive volume provides an almost 3 times increase of the probability of energy output; a maximum value of energy output actually remains unchanged with proton energies above 50 MeV.

Key words: proton radiation, integrated circuit, energy output, charge collection effect, GEANT4 numerical code.

ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате WinWord или LaTeX (с использованием стандартного стиля article).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);

2) разрешение на открытое опубликование от организации, в которой выполнена работа.

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны полностью соответствовать указанным в представленной рукописи. Необходимо также сообщить номер телефона или электронный адрес для обратной связи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием статьи необходимо указать УДК. Разделы и подразделы текста должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, соответствующее стандартам по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например, a и α ("альфа"), v и ν ("ню"), c и C) желательно делать пометки. При этом строчные (малые) буквы следует помечать двумя черточками сверху (например, \bar{c} , \bar{k} , \bar{z} , \bar{d}), а прописные (большие) — двумя черточками снизу (например, \underline{C} , \underline{K} , \underline{Z} , \underline{Q}). Для отличия цифры 0 от буквы O цифру следует перечеркивать косой чертой. Должны различаться по написанию единица, штрих и запятая в индексах, а также буквы e и l , I и J . Необходимо выделять (жирным шрифтом или стрелкой) векторные величины.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисовочные подписи. Рисунки также необходимо представить в виде графических файлов в формате .eps или .jpg. Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют символьными (цифровыми) обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисовочной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы (отчеты) не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАИТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail: sokol@vniief.ru