

Целями данного расчета были оценка корректности построения полного изотопного состава и поиска всех цепей распада для сложной изотопной системы и проверка работы программы при ненулевых концентрациях дочерних изотопов. Так полная система включает 17 радиоактивных и один стабильный изотоп, для которых было выявлено 12 цепей распада. Контроль осуществлялся по балансу атомов и по выходу системы на радиоактивное равновесие.

### **Выводы и перспективы развития модуля**

Разработанный модуль в настоящее время позволяет решать широкий круг практических задач, связанных с моделированием радиоактивного распада в многокомпонентных системах. В рамках дальнейшего развития программного модуля планируется решение следующих задач:

- а) включение в расчет модели спонтанного деления ядер (актуально для трансурановых элементов);
- б) расчет количества выделяющихся частиц – продуктов распада (альфа, бета, нейтрино и др.);
- в) расчет энерговыделения при радиоактивном распаде;
- г) пополнение баз данных параметрами, необходимыми для решения вышеуказанных задач;
- д) разработка интерфейса пользователя для задания параметров изотопных систем и анализа результатов расчетов.

### **Литература**

1. Алейников А. Ю., Бардина М. Н., Глазунов В. А., Горев В. В., Горев И. В. и др. Параллельная версия пакета программ НИМФА // Наука – фундамент решения проблем технологического развития России. Ч. 2. Казань: Казанский университет, 2012. С. 20–43.
2. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1971.

## **МОНОТОННЫЙ МЕТОД ЧАСТИЦ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ С УЧЕТОМ УПРУГОПЛАСТИКИ И ГОРЕНИЯ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ**

*В. А. Шмелев, Ю. В. Янилкин*

Российский Федеральный Ядерный Центр –  
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

### **Введение**

Проблема корректного расчета движения многокомпонентной среды является наиболее серьезной проблемой для лагранжево-эйлеровых и эйлеровых методик, особенно в смешанных ячейках в окрестности контактных границ (КГ). Имеются два основных подхода к решению уравнения адвекции для многокомпонентной среды.

Первый из них основан на выделении КГ и определении их положения на каждом счетном шаге. При этом контактная граница может выделяться явным образом или же восстанавливаться на каждом счетном шаге по полю концентраций. На последнем алгоритме основаны методы типа

концентраций [1], получившие широкое распространение. Вторым подходом основан на применении методов частиц [2]. В этом случае потоки веществ из смешанных ячеек определяются частицами, которые несут с собой дискретные количества веществ со своими термодинамическими параметрами.

Оба подхода имеют свои достоинства и недостатки. Достоинства метода частиц связаны с лагранжевым представлением частиц и возможностью хранения информации о среде в них, что позволяет минимизировать погрешности эйлеровых методов, связанные с решением уравнения адвекции. Основным недостатком метода частиц является сильная немонотонность решения, связанная с дискретным переносом величин, связанных с частицами, из ячейки в ячейку.

В работе [3] предложен монотонный метод частиц (ММЧ) для газодинамических течений, в котором решена проблема немонотонности решения, реализованный в рамках двумерной части методики ЭГАК [4, 5]. Приемлемый уровень монотонности метода частиц обеспечивается путем дробления частиц таким образом, чтобы вытекающий из ячейки объем частиц соответствовал объему, получающемуся при вычислении объема по стандартным схемам методики. Чтобы не породить бесконечную цепочку дробления, в дальнейшем раздробленные частицы вновь объединяются при условии попадания в одну счетную ячейку.

Процессы детонации и горения взрывчатых веществ (ВВ) представляют собой важные с практической точки зрения явления, требующие точного описания при численном моделировании ударноволновых течений. Для моделирования этих процессов, как правило, используется та или иная кинетика для лагранжевых частиц ВВ. В силу этого при использовании лагранжевых сеток аппроксимация уравнений кинетики не представляет сложности. Однако при использовании эйлеровых или лагранжево-эйлеровых сеток возникает проблема корректной реализации алгоритмов кинетики из-за наличия схемной вязкости при аппроксимации членов конвективного переноса на эйлеровом этапе вычислений. Для решения проблемы, как правило, приходится привлекать дополнительные переменные и вычисления. Таким образом удается минимизировать соответствующие погрешности, однако, даже такие усложненные алгоритмы не позволяют решить проблему полностью. Для лучшего описания экспериментальных данных приходится заново подбирать константы моделей кинетики, которые, таким образом, будут отличаться от констант, подобранных теоретически или, в крайнем случае, на лагранжевых расчетах. Конечно, можно иметь разные наборы констант для разных сеток, однако такой подход не является оптимальным, тем более что расчеты могут проводиться и на лагранжево-эйлеровых сетках. С этой точки зрения, метод лагранжевых частиц представляется приемлемым решением проблемы эйлеровых расчетов. Однако известно, что задачи горения ВВ весьма чувствительны к немонотонностям в численных расчетах, поэтому классический метод частиц не нашел применения в таких задачах.

Аналогичные проблемы возникают при применении эйлеровых методов для задач упругопластики (УП), особенно при наличии разрушений и связанных с этим процессов. Модели разрушения и их развития так же, как и модели кинетики горения ВВ, разрабатываются для лагранжевых точек в виде соответствующих кинетик, имеющих определенную историю.

В настоящей работе предлагается развитие ММЧ для указанных выше процессов, а именно для кинетики горения ВВ по модели Морозова и соавторов (модели МК) [6, 7] и для упругопластики [8, 9]. Использование ММЧ позволило уменьшить влияние указанной выше погрешности эйлеровых методов вследствие наличия схемной вязкости, а также немонотонности классического метода частиц. Также приводятся результаты тестовых задач, подтверждающие хорошую точность метода ММЧ и для задач горения ВВ, и для упругопластики. Вопросы касательно кинетик разрушения в настоящей работе не рассматриваются, так как позднее им будет посвящена отдельная работа.

## 1. Постановка задачи. Этапы решения

В методике ЭГАК для численного решения системы уравнений многокомпонентной газовой динамики в двумерном приближении основными величинами являются компоненты вектора скоро-

сти  $(u_x, u_y)$ , определенные в узлах сетки с координатами  $(x; y)$ , и термодинамические величины, определенные в ячейках – плотность  $\rho_\xi$ , удельная (на единицу массы) внутренняя энергия  $e_\xi$  и объемные концентрации  $\beta_\xi = V_\xi/V$  веществ (компонентов) среды.

Взрывчатые вещества (ВВ) и продукты взрыва (ПВ) для кинетики МК рассматриваются как разные вещества со своими объемными концентрациями, плотностями и удельными энергиями. Разными у них могут быть и уравнения состояния (УРС). В соответствии с этим подходом при детонации и горении ВВ переходит в вещество ПВ, передав ему энергию в соответствии с заданной калорийностью или в соответствии с кинетикой выгорания [6]. Кроме того, в силу особенностей методики, в стандартной программе расчета горения методом МК для описания ВВ и ПВ в различных состояниях необходимо описывать как четыре вещества. Два вещества для описания ВВ и два вещества для ПВ.

Процесс УП состоит из аппроксимации уравнений движения и энергии с учетом тензора напряжений и тензора скоростей деформации [8, 9].

В расчетах задавать все компоненты среды с применением частиц не всегда рационально в силу необходимости использования дополнительных ресурсов компьютера. Поэтому применение частиц должно быть ограничено. Целесообразно применять их для тех компонентов, для которых погрешности, связанные с решением уравнения адвекции, наиболее ощутимы, например, для тонких слоев или веществ, которые требуют хранения истории поведения лагранжевой частицы.

Для таких компонентов необходимо задать данные о частицах. Каждая частица имеет порядковый номер  $p$ , номер вещества, номер ячейки счетной сетки, в которой частица находится, и пространственные координаты  $x_p(t)$ ,  $y_p(t)$ . Также для всех частиц дублируется информация о состоянии вещества (плотность, удельная внутренняя энергия, объем):  $\rho_{\xi p}$ ,  $e_{\xi p}$ ,  $V_{\xi p}$  ( $\xi$  – номер вещества). Массы частиц хранить нет необходимости, так как, зная плотность и объем, можем вычислить и массу. Кроме того, в кинетике МК для частиц ВВ нужно хранить такие дополнительные величины, как  $W_{\xi p}$  – признак прохождения фронта первой ударной волны (УВ);  $W_{0\xi p}$  – выгорание ВВ (отношение оставшейся массы частицы ВВ к первоначальной массе частицы ВВ), полученное при прохождении фронта первой УВ.

В стандартной схеме методики ЭГМК компоненты девиатора тензора напряжений отнесены к веществам, то есть заданы массивы  $S_{XX\xi}$ ,  $S_{XY\xi}$  и  $S_{YY\xi}$ . Так же и для частиц необходимо задать эти массивы с компонентами тензора:  $S_{XX\xi p}$ ,  $S_{XY\xi p}$  и  $S_{YY\xi p}$ .

Решение уравнений газодинамики с учетом прочности, а также горение ВВ методом МК производится с привлечением метода расщепления на этапы, последовательность выполнения которых приводится на рис. 1. Процесс УП разбит на два подэтапа. Сначала аппроксимируется уравнение движения – вычисляются приращения скорости за счет напряжений. Затем уравнение энергии, аппроксимация которого сводится к вычислению новых значений напряжений и энергии. Подэтапы УП рассчитываются до и после этапа лагранжевой газодинамики, на котором решаются уравнения газодинамики без конвективных членов. Расчет кинетики МК производится между лагранжевым и эйлеровым этапами газодинамики. На эйлеровом этапе производится построение (восстановление) новой счетной сетки по полю скоростей узлов сетки и пересчет величин на эту сетку. При этом в качестве начальных данных используются значения величин, полученные на предыдущих этапах вычислений.



Рис. 1. Схема последовательности этапов решения за один счетный шаг

## 2. Лагранжев этап

Решению задач газодинамики посвящена работа [3], поэтому некоторые моменты в рамках настоящего доклада будут опускаться.

Аппроксимация уравнений лагранжевой газодинамики производится по стандартной схеме методики ЭГАК. В результате на лагранжевом этапе вычислений для каждого вещества определяются новые значения скорости в узлах сетки, а также его плотность, энергия и объемная концентрация. Это касается и ячеек, содержащих частицы, причем не имеет значения, является ячейка смешанной (содержащей несколько веществ, часть которых описывается с помощью частиц) или чистой (содержащей только одно вещество, описываемое частицами). Таким образом, вычисления на лагранжевом этапе для частиц сводятся к двум действиям.

**1. Вычисление новых координат частиц методом билинейной интерполяции по положению узлов сетки после расчета по схеме методики ЭГАК.** Здесь используется предположение о сохранении относительного положения частиц и узлов сетки при ее деформации на данном этапе вычислений, то есть частицы движутся вместе с ячейкой, в которой находятся, не выходя за ее пределы. Относительное изменение положения частиц в ячейке происходит за счет различия дивергенций (сжатий) различных компонентов вследствие применения той или иной модели замыкания уравнений газодинамики в смешанных ячейках. Для некоторых моделей, замыкая дополнительно, необходимо корректировать и термодинамические величины у частиц в соответствии с формулами моделей.

На рис. 2 приведена деформированная ячейка с расположенной в ней частицей.

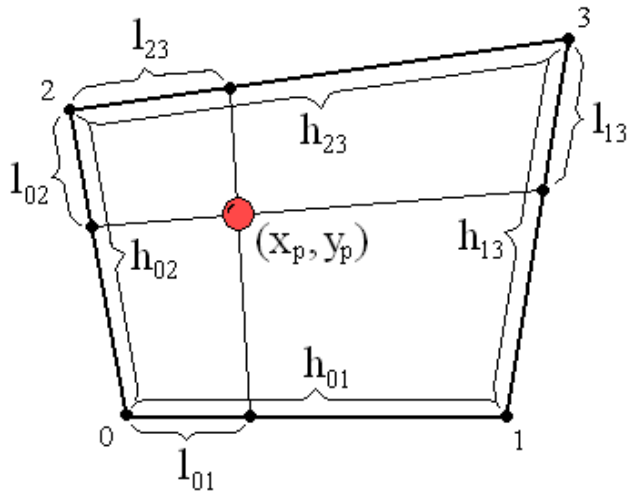


Рис. 2. Схема для пояснения расчета координат частицы

Метод основан на предположении о сохранении величин  $\lambda_x = \frac{l_{01}}{h_{01}} = \frac{l_{23}}{h_{23}}$  и  $\lambda_y = \frac{l_{02}}{h_{02}} = \frac{l_{13}}{h_{13}}$  при

деформации ячейки на лагранжевом этапе:  $\lambda_x^{n+\frac{1}{2}} = \lambda_x^n$  и  $\lambda_y^{n+\frac{1}{2}} = \lambda_y^n$ , откуда и выводятся формулы для нахождения новых координат частицы.

**2. Определение новых значений газодинамических величин для частиц.** Полагаем, что относительные приращения плотности и энергии частиц данного компонента среды равны соответствующим относительным приращениям этих величин, вычисленных для этого компонента по схеме ЭГАК. Отсюда следуют формулы:

$$\rho_{\xi p}^{n+\frac{1}{2}} = \rho_{\xi p}^n + \left( \rho_{\xi}^{n+\frac{1}{2}} - \rho_{\xi}^n \right) \frac{\rho_{\xi p}^n}{\rho_{\xi}^n}, \quad e_{\xi p}^{n+\frac{1}{2}} = e_{\xi p}^n + \left( e_{\xi}^{n+\frac{1}{2}} - e_{\xi}^n \right), \quad V_{\xi p}^{n+\frac{1}{2}} = V_{\xi p}^n \frac{V_{\xi}^{n+\frac{1}{2}}}{V_{\xi}^n}.$$

### 3. Эйлеров этап

Основные трудности при реализации метода частиц связаны с эйлеровым этапом, а именно с расчетом потоков массы и внутренней энергии из ячейки в ячейку. В классическом методе частиц Харлоу при переходе частицы в соседнюю ячейку все ее параметры «переходят» вместе с ней. В связи с дискретным (и, соответственно, немонотонным) характером переноса всех величин, этому методу свойственна большая немонотонность профилей величин.

Рассмотрим алгоритм деления частиц, позволяющий снизить до приемлемого минимума немонотонность классического метода частиц, сохранив при этом его достоинства. Суть алгоритма деления приведем лишь в объеме, необходимом для понимания сути, так как с подробным описанием можно ознакомиться в вышеуказанной работе [3]. На рис. 3 приведена схема работы алгоритма в одномерном случае на примере перетекания между ячейками одной частицы.

На рисунках приводятся две счетные ячейки, в которых содержатся частицы, обозначенные точками, а штриховыми отрезками указаны воображаемые границы объемов. При вычислениях необходимы лишь численные значения объемов, а их конфигурации не хранятся. Поток вещества направлен слева направо в соответствии с указанной скоростью движения  $\mathbf{u}$ . Тогда вытекающий из ячейки слева поток вещества объема  $\Delta V$  (далее будем использовать термин *поток объема*, выде-

лен более темным цветом) равен произведению длины поперечного ребра ячейки  $L$  на величину  $u\tau$ , то есть  $\Delta V = Lu\tau$  (\*).

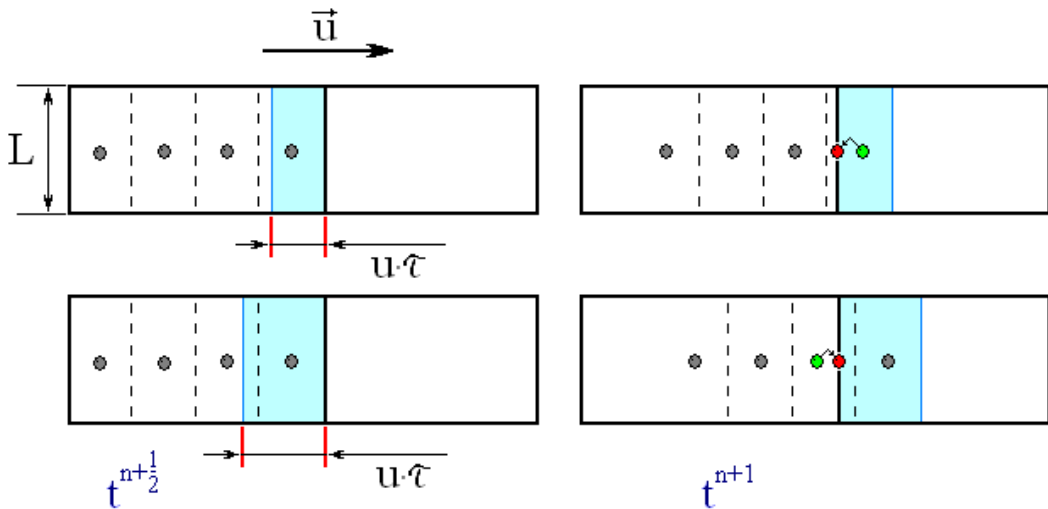


Рис. 3. Схема алгоритма деления частиц в 1D случае для одной частицы

Причиной немонотонности классического метода частиц является несовпадение потока объема, сосчитанного по формуле (\*), с объемом частицы, перешедшей через граничное ребро ячейки. В одном случае (верхняя часть рис. 3) из ячейки слева перемещается объем, меньший объема частицы, в другом (нижняя часть рис. 3) – больший объема частицы. Введем следующее обозначение  $\delta V = \Delta V - V_p$ , где  $\Delta V$  – величина потока объема, сосчитанного по формуле (\*),  $V_p$  – объем частицы с номером  $p$ , перешедшей из одной ячейки в другую, и рассмотрим оба этих случая.

**1. Поток объема  $\Delta V$  меньше объема перемещающейся частицы ( $\delta V < 0$ ).** Первый случай приведен на верхней части рис. 3. Левая часть рис. 3 – состояние после лагранжевого этапа вычислений – на момент  $t^{n+1/2}$ , правая часть – на момент  $t^{n+1}$ . В этом случае частица, перешедшая из донорной ячейки в акцепторную, делится на две части – материнскую и дочернюю. Материнская частица перейдет в акцепторную ячейку, приобретая координаты в соответствии с ее скоростью и объем, равный вытекающему из донорной ячейки объему  $\Delta V$ . Дочерняя частица получает объем, равный разности объема первоначальной частицы и потока объема  $\Delta V$ , и помещается в донорную ячейку, приобретая координаты на стороне ячейки. Материнская и дочерняя частицы обозначены соответственно зеленым и красным цветами.

**2. Поток объема  $\Delta V$  больше объема перемещающейся частицы ( $\delta V > 0$ ).** Данная ситуация отображена на нижней части рис. 3. В этом случае необходимо восполнить недостаток объема переходящей частицы за счет принудительного перемещения некоторых частиц или фрагментов частиц из донорной ячейки в акцепторную. Таким образом, дробится ближайшая к общему ребру этих ячеек частица из неперешедших в акцепторную ячейку. Она порождает дочернюю частицу объемом, равным разности объемов  $\delta V$ , которая помещается в акцепторную ячейку с координатами на общем ребре донорной и акцепторной ячеек.

### Обобщим алгоритм на более сложные случаи

При перемещении из ячейки в ячейку не одной, а сразу нескольких частиц  $\delta V = \Delta V - \sum_p V_p$ , где  $\Delta V$  – потока объема, сосчитанный по формуле (\*);  $V_p$  – объем частицы с номером  $p$ , перешедшей

из ячейки в ячейку; суммирование ведется по всем перешедшим частицам. В этом случае частицы будут делиться по очереди в порядке увеличения расстояния от частицы до смежного ребра ячеек.

В двумерном случае, прежде всего, представляет интерес случай перехода частицы в соседнюю ячейку, расположенную по диагонали от донорной ячейки (рис. 4). Этот случай является особым из-за того, что в методике ЭГАК при решении уравнения адвекции не предусмотрен расчет потоков из ячейки в ячейку по диагонали.

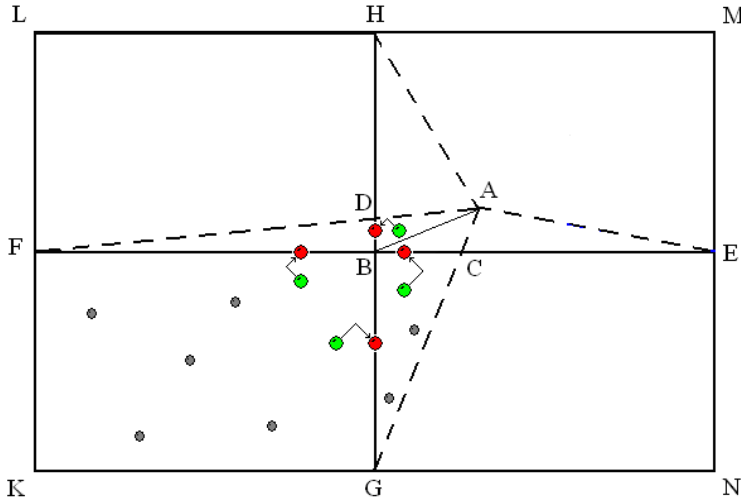


Рис. 4. Схема алгоритма деления частиц в 2D случае

Так как в этом случае расчет потоков происходит с использованием расщепления по направлениям, то и частицы будут попадать в ячейку по диагонали только через соседние ячейки, имеющие с донорной ячейкой общую сторону. Алгоритм деления при этом работает без изменений.

При делении частиц используются следующие общие принципы:

- у материнских частиц какой-либо информации о дочерних не содержится;
- для дочерней частицы хранится номер материнской, который одновременно служит признаком того, что частица является дочерней;
- у одной материнской частицы может быть несколько дочерних;
- у дочерней частицы может быть только одна материнская;
- дочерние частицы также могут делиться, при этом дочерние частицы более высокого порядка наследуют номер первоначальной материнской частицы;
- термодинамическое состояние делящейся частицы дублируется и для дочерней частицы.

В противовес делению частиц разработан алгоритм их объединения. Данная процедура необходима для предотвращения бесконтрольного роста количества частиц при их дроблении. Две частицы одного и того же вещества, находящиеся в пределах одной ячейки, подлежат объединению, если выполняется один из следующих критериев:

- одна из частиц является дочерней по отношению к другой;
- две дочерние частицы имеют одну и ту же материнскую;
- одна из частиц имеет относительно малый объем;
- при избыточном количестве частиц в ячейке предусмотрены механизмы принудительного объединения частиц в пределах одного вещества.

Эйлеров этап завершается пересчетом величин с частиц на содержащие их ячейки по формулам:

$$\rho_{\xi}^{n+1} = \sum_p \rho_{\xi p} V_{\xi p} / \sum_p V_{\xi p},$$

$$e_{\xi}^{n+1} = \sum_p e_{\xi p} \rho_{\xi p} V_{\xi p} / \sum_p \rho_{\xi p} V_{\xi p},$$

где суммирование ведется по частицам компонента  $\xi$  в рассматриваемой ячейке.

#### 4. Расчет процесса горения ВВ

Как отмечалось во введении, метод расчета процесса горения ВВ для ММЧ реализован в виде кинетики модели МК на основе работы [6], поэтому в данном отчете будут приведены только особенности алгоритмов кинетики МК для расчета с помощью частиц ММЧ. На рис. 5 приведена схема управляющей программы ММЧ для расчета процесса кинетики МК в одной ячейке.

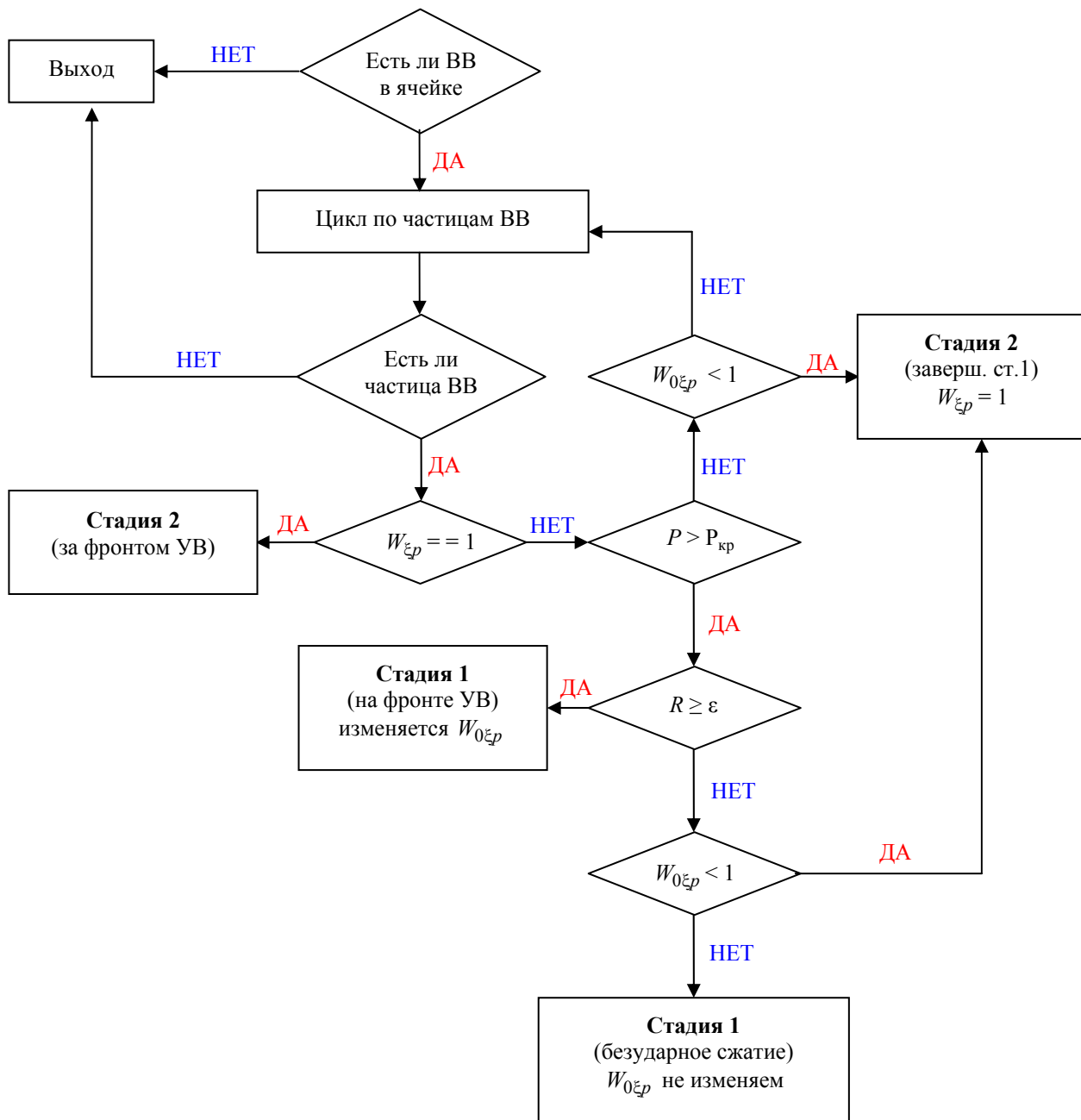


Рис. 5. Схема управляющей программы ММЧ для кинетики МК

Для кинетики МК в дополнение к газодинамическим величинам ММЧ нам понадобятся следующие данные для частиц ВВ:  $W_{xi_p}$  – признак прохождения фронта первой ударной волны и  $W_{0xi_p}$  – выгорание ВВ (отношение оставшейся массы частицы ВВ к первоначальной массе частицы ВВ),



полученное при прохождении фронта первой УВ. Однако в ММЧ для ВВ и ПВ заводятся по одному веществу, здесь нет необходимости для ВВ и ПВ задавать по 2 вещества, как это сделано в методике ЭГАК.

Кинетика МК двустадийная. Первая стадия (мгновенная, так как имеет место высокая скорость разложения ВВ) начинается с приходом в ячейку первой (инициирующей) УВ и заканчивается с ее уходом. Наличие УВ определяется согласно критерию, содержащему вязкое давление. На этой стадии происходит генерация очагов горения ВВ. На второй стадии происходит развитие очагов горения и завершение разложения ВВ с меньшей по сравнению с первой стадией скоростью разложения ВВ. При этом величина  $W_{0\varepsilon p}$ , полученная на первой стадии, будет являться одной из констант для второй стадии.

Счет реализован следующим образом. Если в ячейке присутствует ВВ, входим в цикл по частицам, содержащимся в ячейке, иначе идем на следующую ячейку в цикле. В цикле по частицам ищем частицу (покажем на примере одной частицы) ВВ. Сначала проверяем, находится ли данная частица во второй стадии горения (признак  $W_{\varepsilon p} = 1$ ). Если да, запускаем для этой частицы подпрограмму расчета второй стадии горения. Если нет, пускаем программу по ветке, где проверяются следующие условия для определения, горит ли частица, и в какой из стадий (см. рис. 2):

- $P > P_{кр}$ , где  $P$  – давление ячейки,  $P_{кр}$  – давление, которое нужно превысить, чтобы возбудить горение (критическое давление – одна из констант кинетики МК);

- $R \geq \varepsilon$ , где  $R = \frac{q}{q + P}$  – критерий для определения присутствия в ячейке УВ,

$q = \rho_{cell} h \operatorname{div} \bar{u} (k_q h \operatorname{div} \bar{u} - k_l c_w)$  – счетная вязкость,  $\varepsilon$  – одна из констант (чаще всего  $\varepsilon = 0,001$ ),  $h$  – характерный размер ячейки,  $k_q$  и  $k_l$  – соответственно коэффициенты квадратичной и линейной вязкости,  $c_w$  – скорость звука;

- $W_{0\varepsilon p} < 1$  – признак перехода на вторую стадию при условии отсутствия УВ в ячейке, так как при работе первой стадии горения сохраняется массовая концентрация (отношение оставшейся массы частицы ВВ к первоначальной массе частицы ВВ), и далее, на второй стадии, величина  $W_{0\varepsilon p}$  присутствует только в виде константы.

Частицы ВВ и ПВ в рамках кинетики МК имеют определенные свойства:

- При горении частица ВВ образует частицу ПВ, которой передает часть своего объема, массы и связанные с ними параметры в соответствии с формулами модели МК. При этом частица ПВ имеет те же пространственные координаты, что и породившая ее частица ВВ. Частица ВВ, таким образом, будет являться материнской частицей по отношению к частице ПВ, но будет иметь свой номер вещества.

- Если рассмотренная выше частица ПВ уже существует, то ее параметры будут пересчитываться исходя из кинетики горения частицы ВВ. Новой частицы ПВ создаваться не будет.

- Если по каким-либо особенностям течения частица ПВ разобьется с частицей ВВ, то создается новая частица ПВ.

- В формулах расчета горения ВВ и образования ПВ будут фигурировать следующие величины, полученные от частиц:  $\alpha_{ВВ}$ ,  $\alpha_{ПВ}$ ,  $\beta_{ВВ}$ ,  $\beta_{ПВ}$  – массовые и объемные концентрации частицы

ВВ и соответствующей частицы ПВ относительно их общей массы и объема ( $\alpha_{ВВ} = \frac{m_{pВВ}}{m_{pВВ} + m_{pПВ}}$  и т.д.)<sup>1</sup>;  $P_{ВВ}$  и  $P_{ПВ}$  – давления частиц, рассчитанные УРС по плотности и энергии частиц ВВ и ПВ;

<sup>1</sup>Эти концентрации не обязательно совпадают с концентрациями соответствующих компонентов в ячейке, так как в ячейке могут содержаться и другие вещества, помимо ВВ и ПВ.

$\rho_{\text{ВВ}}$ ,  $\rho_{\text{ПВ}}$ ,  $e_{\text{ВВ}}$ ,  $e_{\text{ПВ}}$  – плотности и энергии частиц до расчета процесса кинетики горения;  $W_0$  – концентрация ВВ после завершения первой стадии ( $W_{0\xi p}$ ).

$\alpha_{\text{ВВ}}^{n+1}$  – искомая величина, которую вычисляем в подпрограммах первой или второй стадий. Найдя ее, определяем остальные требуемые величины:

$$\begin{aligned}\alpha_{\text{ПВ}}^{n+1} &= \alpha_{\text{ПВ}} + \alpha_{\text{ВВ}} - \alpha_{\text{ВВ}}^{n+1}, \\ \beta_{\text{ВВ}}^{n+1} &= \frac{\beta_{\text{ВВ}} \alpha_{\text{ВВ}}^{n+1}}{\alpha_{\text{ВВ}}}, \quad \beta_{\text{ПВ}}^{n+1} = \beta_{\text{ПВ}} + \beta_{\text{ВВ}} - \beta_{\text{ВВ}}^{n+1}, \\ \rho_{\text{ПВ}}^{n+1} &= \frac{1}{\beta_{\text{ПВ}}^{n+1}} \left( \rho_{\text{ПВ}} \beta_{\text{ПВ}} + \rho_{\text{ВВ}} \left( \beta_{\text{ПВ}}^{n+1} - \beta_{\text{ПВ}} \right) \right), \\ e_{\text{ПВ}}^{n+1} &= \frac{1}{\alpha_{\text{ПВ}}^{n+1}} \left( e_{\text{ПВ}} \alpha_{\text{ПВ}} + (e_{\text{ВВ}} + Q) \left( \beta_{\text{ВВ}}^{n+1} - \beta_{\text{ВВ}} \right) \right), \text{ где } Q - \text{калорийность ВВ.}\end{aligned}$$

Сами формулы для стадий горения известны и подробно описаны в указанных выше работах, поэтому здесь их повторять нецелесообразно.

### О выборе констант

Кинетика МК содержит большое количество констант, которые могут зависеть как от газодинамической методики, на основе которой она реализована, так и от типа используемой счетной сетки. Далее, в расчетах ММЧ будут использованы константы, подобранные на лагранжевых расчетах по методике Д. Применение констант от лагранжевой методики обусловлено тем, что ММЧ также использует лагранжево представление рассматриваемых процессов. Расчеты по эйлеровой методике ЭГАК будут проведены с собственными константами.

## 5. Учет упругопластических свойств

Как говорилось выше, процесс упругопластики разбит на два подэтапа: решение уравнения движения – вычисление приращения скоростей узлов сетки за счет тензора напряжений и решение уравнения энергии, аппроксимация которого сводится к вычислению новых значений энергии и компонентов тензора напряжений. Обобщение ММЧ для учета УП сводится к решению уравнения адвекции для дивергента тензора напряжений. Подэтапы вычислений в этом случае примут следующий вид.

**Первый этап.** Так как у частиц ММЧ не существует массивов скорости (новые координаты частиц вычисляются билинейной интерполяцией по узлам сетки на этапе лагранжевой ГД), первый этап УП для ММЧ сводится к пересчету напряжений с частиц на ячейки:

$$S_{XX\xi} = \frac{\sum S_{XX\xi p} V_{\xi p}}{\beta_{\xi} V_{\text{cell}}}, \quad S_{XY\xi} = \frac{\sum S_{XY\xi p} V_{\xi p}}{\beta_{\xi} V_{\text{cell}}}, \quad S_{YY\xi} = \frac{\sum S_{YY\xi p} V_{\xi p}}{\beta_{\xi} V_{\text{cell}}}.$$

Далее расчет приращений компонент скорости идет по стандартной схеме ЭГАК.

**Второй этап.** После работы второго этапа УП стандартной методики необходимо пересчитать полученные при этом значения величин с ячеек на частицы. А именно, новые значения напряжений и энергии для частиц будут пересчитаны следующим образом:

$$S_{XX\xi}^{n+1} = S_{XX\xi}^n + S_{\xi}^{n+1} - S_{\xi}^n,$$

$$S_{XY\xi p}^{n+1} = S_{XY\xi p}^n + S_{\xi}^{n+1} - S_{\xi}^n,$$

$$S_{YY\xi p}^{n+1} = S_{YY\xi p}^n + S_{\xi}^{n+1} - S_{\xi}^n,$$

$$e_{\xi p}^{n+1} = e_{\xi p}^n + e_{\xi}^{n+1} - e_{\xi}^n.$$

## 6. Тестирование метода

**Задача 1. Двумерная задача о движении и вращении фигуры сложной формы.** Область  $0 < x < 50$ ,  $0 < y < 50$  с сеткой  $50 \times 50$  ячеек разделена на две подобласти. Подобласть в форме креста занята газом с параметрами  $\rho_0 = 10$ ,  $e_0 = 0$ , остальная часть области с газом с параметрами  $\rho_0 = 1$ ,  $e_0 = 0$ . В узлах заданы значения линейной скорости  $u_x = 1$  и  $u_y = 1$ , а также угловая скорость вращения относительно центра фигуры  $\omega$ . Значение  $\omega$  выбирается из такого соображения, чтобы за время перемещения фигуры в противоположную часть области ( $t = T$ ), фигура сделала бы поворот на угол  $\pi$ . В данном случае  $T = 25$ ,  $\omega = \pi/T$ . В данной задаче газодинамика отсутствует, и задача сводится к решению уравнения адвекции. Расчеты проводились на неподвижной сетке с заданием для ММЧ по 4 частицы на ячейку в начальный момент времени.

Результаты расчетов по ММЧ и по методике ЭГАК (здесь и далее термин ЭГАК используется для обозначения одноименной методики, основанной на сеточном подходе) приведены в форме растровых картин объемных концентраций на момент времени  $t = 25$  (см. рис. 6). Из рисунка видно, что при решении линейного уравнения переноса ММЧ дает точный результат.

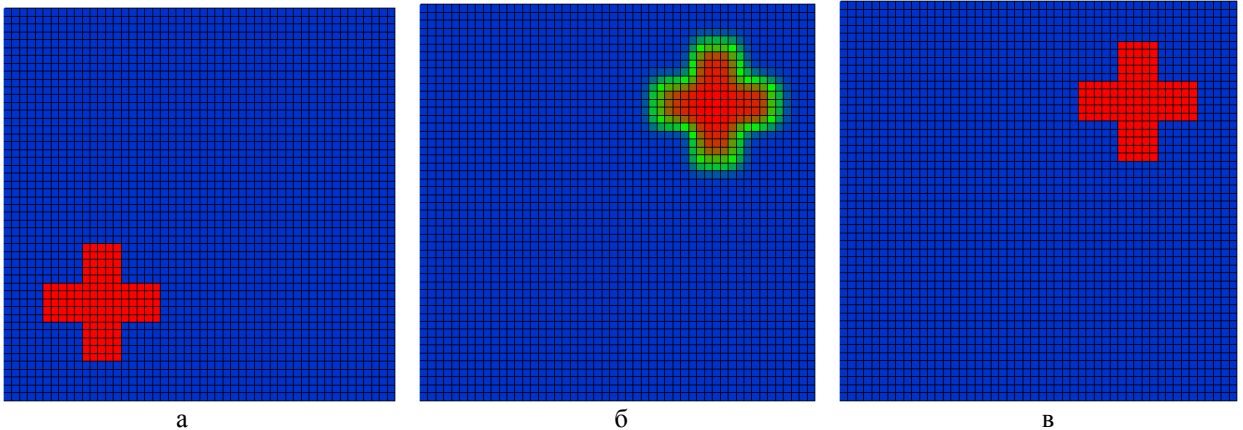


Рис. 6. Растровые картины объемных концентраций: а –  $t = 0$ ; б – ЭГАК при  $t = 25$ ; в – ММЧ при  $t = 25$

**Задача 2. Точечный взрыв.** В области  $0 < x < 20$ ,  $0 < y < 20$  имеются два вещества (рис. 7,а): в круге радиуса 0,1 с центром в начале координат помещен идеальный газ с параметрами  $\rho = 1$ ,  $e = 1$ ,  $P = 0$ ,  $\gamma = 1,4$  (вещество 0); в остальной части области – идеальный газ с параметрами  $\rho = 1$ ,  $e = 0$ ,  $P = 0$ ,  $\gamma = 1,4$  (вещество 1).

Проведены расчеты методами ММЧ и ЭГАК на неподвижной прямоугольной счетной сетке размером  $100 \times 100$  ячеек. В расчете ММЧ в начальный момент времени задавались по 4 частицы на ячейку.

Результаты расчета по ММЧ представлены на рис. 10,б в виде растровой картины плотности на момент времени  $t = 100$ , а также на рис. 8 в виде графиков  $\rho(r)$ .

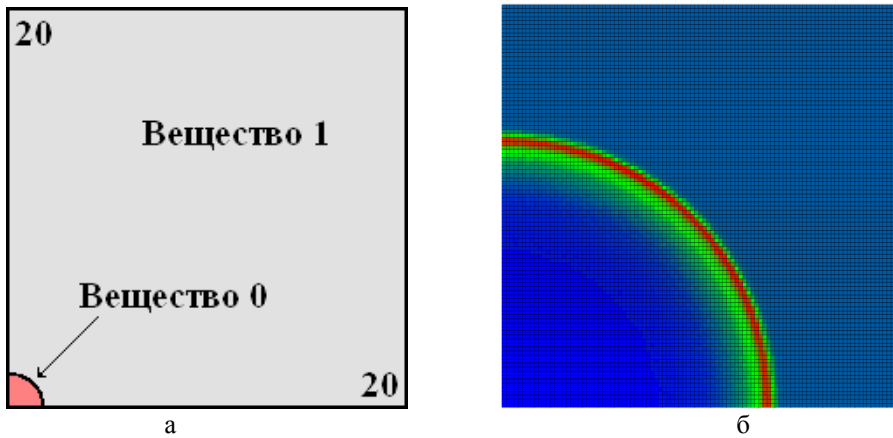


Рис. 7. Постановка задачи (а); растровая картина плотности на момент  $t = 100$  (б)

На рис. 8 приводятся графики зависимости плотности от радиуса для всех ячеек части счетной области, где в данный момент находится ударная волна. Они демонстрируют степень сохранения сферической симметрии рассматриваемого течения различными методами.

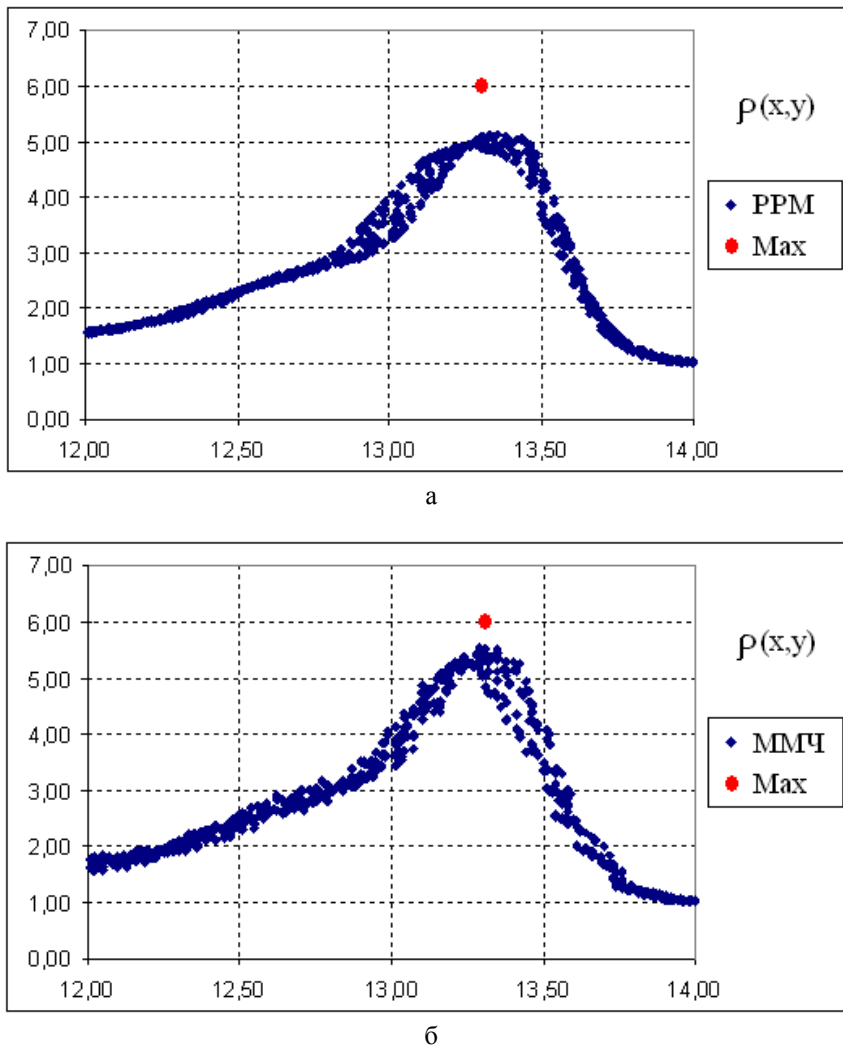


Рис. 8. Зависимость плотности от радиуса в окрестности УВ,  $t = 100$ : а – ЭГАК; б – ММЧ

Из представленных рисунков видно, что и в этой задаче решение ММЧ ближе к теоретическому по амплитуде УВ в сравнении с расчетом ЭГАК при сохранении приемлемой сферичности течения.

**Задача 3. Инициирование горения ПБС от удара пластины.** Геометрия состоит из неподвижного образца из ПБС длиной 2 и надвигающегося на него со скоростью  $u$  алюминиевого ударника (см. рис. 9).

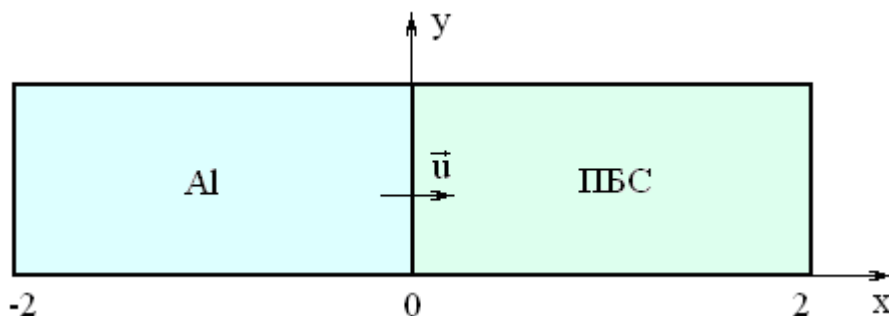


Рис. 9. Геометрия задачи 3

Расчеты проводились в плоской одномерной постановке на неподвижной сетке с размерами ячейки  $h = 0,01$ . Частицами описаны только вещества ВВ и ПВ с использованием 4 частиц на ячейку в начальный момент времени.

На левой границе задан втекающий поток, на правой – вытекающий, верхняя и нижняя границы – жесткие стенки.

Уравнения состояния:

- Al – УрС Ми-Грюнайзена;
- ВВ – УрС Ми-Грюнайзена;
- ПВ – УрС ПВ Зубарева.

За основной критерий оценки полученных результатов примем сравнение глубин возникновения детонации в расчетах ММЧ с результатами работы комплексов Д и ЭГАК.

Для лучшей оценки глубины детонации ( $L$ ) будем применять два способа.

1. За глубину детонации примем расстояние, которое успевает пройти УВ до того, как ее скорость выйдет на постоянное значение. Таким образом, сначала строится таблица функции  $x(t)$ , где  $x$  – геометрическое положение скачка давления, которое определяется как первая точка, в которой  $P > 10$ . Затем строится расчетная таблица функции  $u(x)$ , где  $u = (x_{n+1} - x_n) / (t_{n+1} - t_n)$ . Наконец по графику этой функции снимаем точку  $x$ , в которой значение  $u$  выходит на константу.

2. За глубину детонации примем длину радиус-вектора ячейки, в которой значение давления впервые приближается к постоянному значению, на которое далее выходит решение. То есть, строим график  $P_{\max}(x)$ , из которого снимаем  $L = x$ , где  $x$  – значение, при котором функция  $P_{\max}(x)$  выходит на константу.

Таблица 2

*Глубина детонации в расчетах по Д и в экспериментах Л. А. Гатилова*

№ эксперимента (№ расчета)	$L$ в расчетах по Д
1	1.91
2	1.01
3	0.872
4	0.313
5	0.242

В табл. 3 приведены результаты расчетов по ММЧ и по методике ЭГАК, а на рис. 10 приведен график, построенный на основе табл. 2 и 3.

Таблица 3

*Глубина детонации в расчетах по ММЧ и по методике ЭГАК*

№ расчета	$L$ в расчетах по ММЧ	$L$ в расчетах по ЭГАК
1	Нет детонации	Нет детонации
2	1,02	Нет детонации
3	0,85	1.36
4	0,35	0.97
5	0,28	0.90

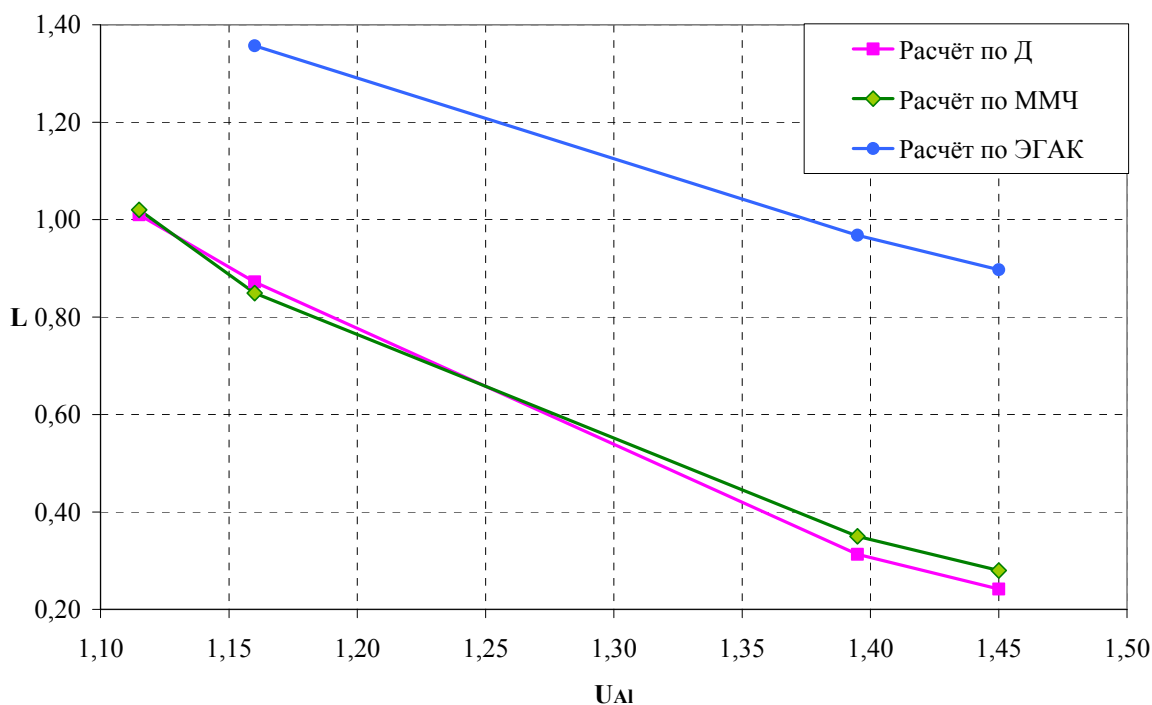


Рис. 10. Глубина возникновения детонации

Из графика видно, что решение с использованием частиц дает лучший результат в сравнении с решением по ЭГАК без применения частиц. Качество решения соответствует решению, получаемому на чисто лагранжевой методике (Д).

**Задача 4. Двумерная задача об иницировании ВВ П-84.** Постановка двумерных расчетов представляет собой задачу об иницировании ВВ П-84 детонационной волной от шашки из П-84. Начальная геометрия представлена на рис. 11. В начальный момент времени, шашка иницируется по линии верхней грани. Детонация в шашке считается с контролем скорости. Синим цветом указаны лучи, вдоль которых будут строиться профили величин. Нумерация начинается с вертикального против часовой стрелки.

Вещества задаются следующим образом:

- ВВ П-84 шашки – УРС «трехчлен» Ми-Грюнайзена;
- ПВ П-84 шашки – УРС Зубарева;
- ВВ П-84 образца – УРС «трехчлен»;
- ПВ П-84 образца – УРС Зубарева.

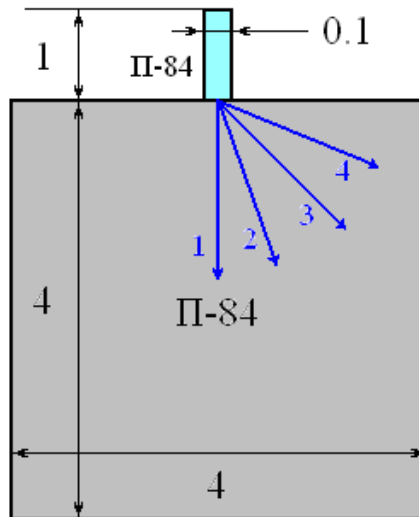
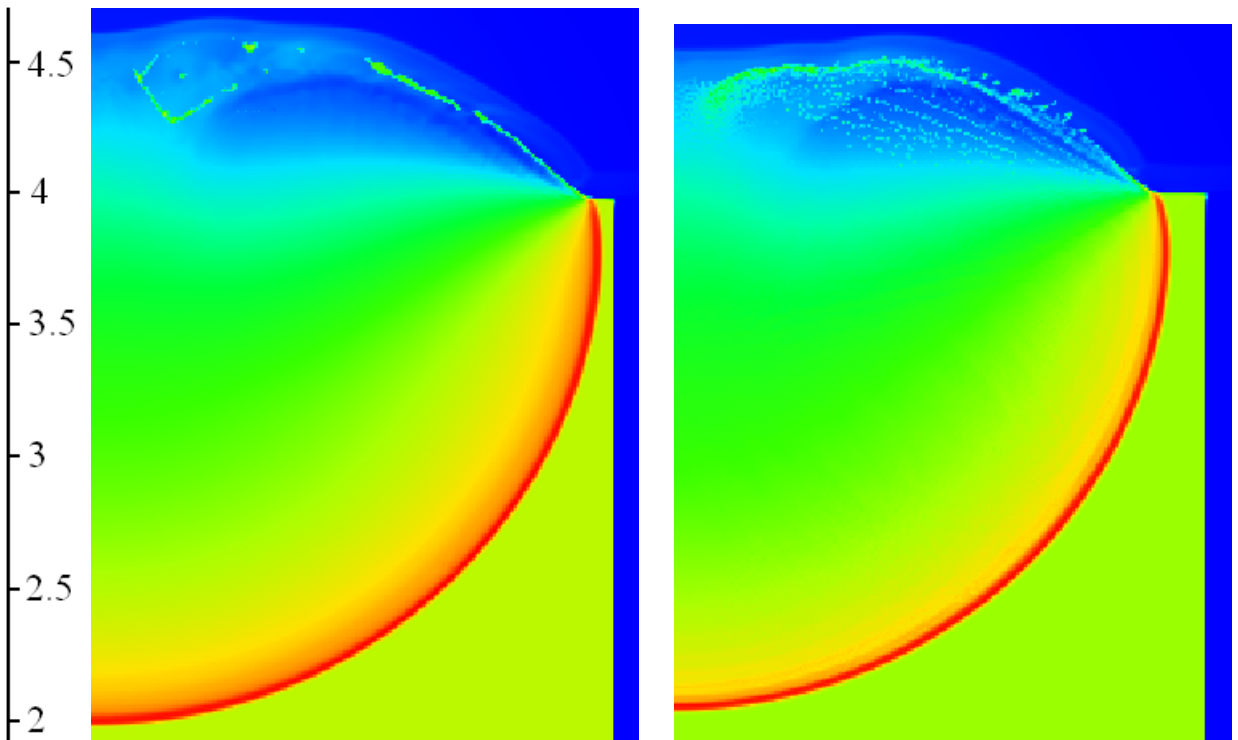


Рис. 11. Начальная геометрия задачи

Для экономии вычислительных ресурсов машины в расчетах взята половина области с осью симметрии вертикально по центру геометрии. Таким образом, граничные условия таковы: на оси симметрии – жесткая стенка, остальные границы – свободные.

Расчеты проводились на неподвижной счетной сетке с размером ячейки  $h = 0,01$ . В расчете ММЧ с помощью частиц задавались только вещества ВВ и ПВ образца. В начальный момент времени на ячейку задавалось по 4 частицы.

На рис. 12 приведены растровые картины средней на момент времени  $t = 0,4$  для расчетов стандартными программами методики ЭГАК и методом ММЧ (с использованием кинетики МК в обоих случаях).

Рис. 12. Растровые картины средней плотности в расчетах ЭГАК (слева) и ММЧ (справа) на момент времени  $t = 0,4$

Из рисунков видно, что сферическая форма течения сохраняется практически без искажений.

На рис. 13, 14 показаны профили давления по четырем лучам, направленным от точки соприкосновения образца с инициирующей шашкой вдоль распространения детонационной волны в расчетах ЭГАК (рис. 13) и ММЧ (рис. 14).

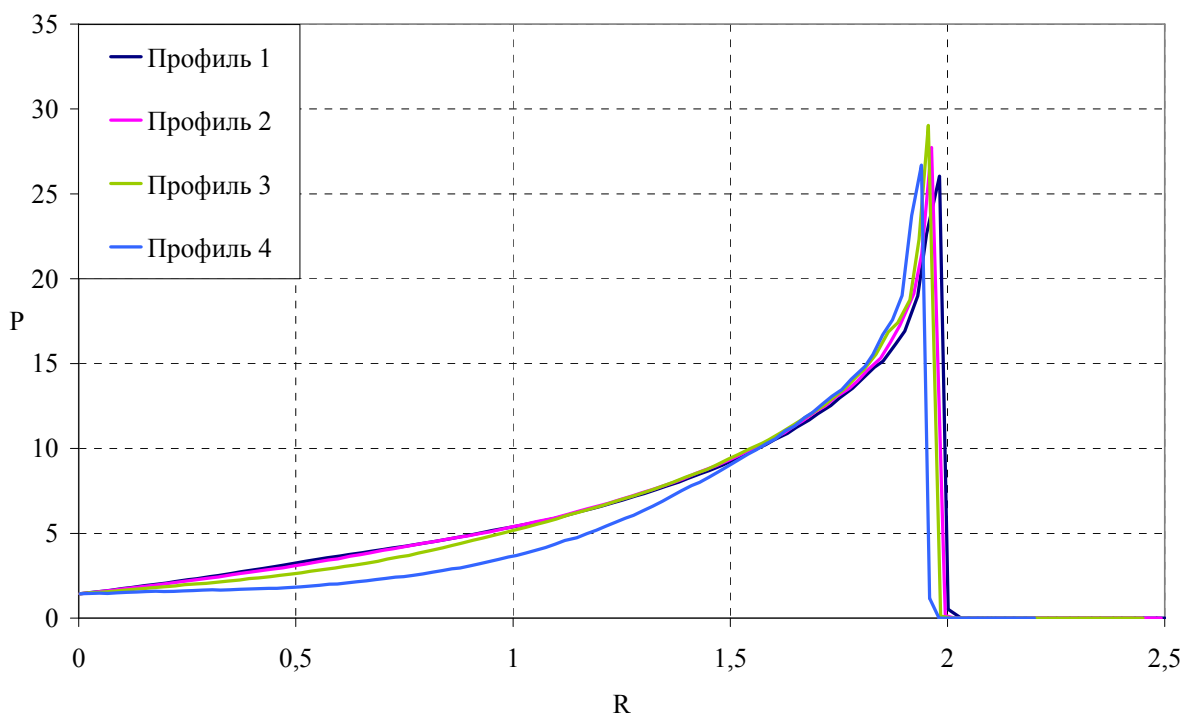


Рис. 13. Профили давления в расчете ЭГАК

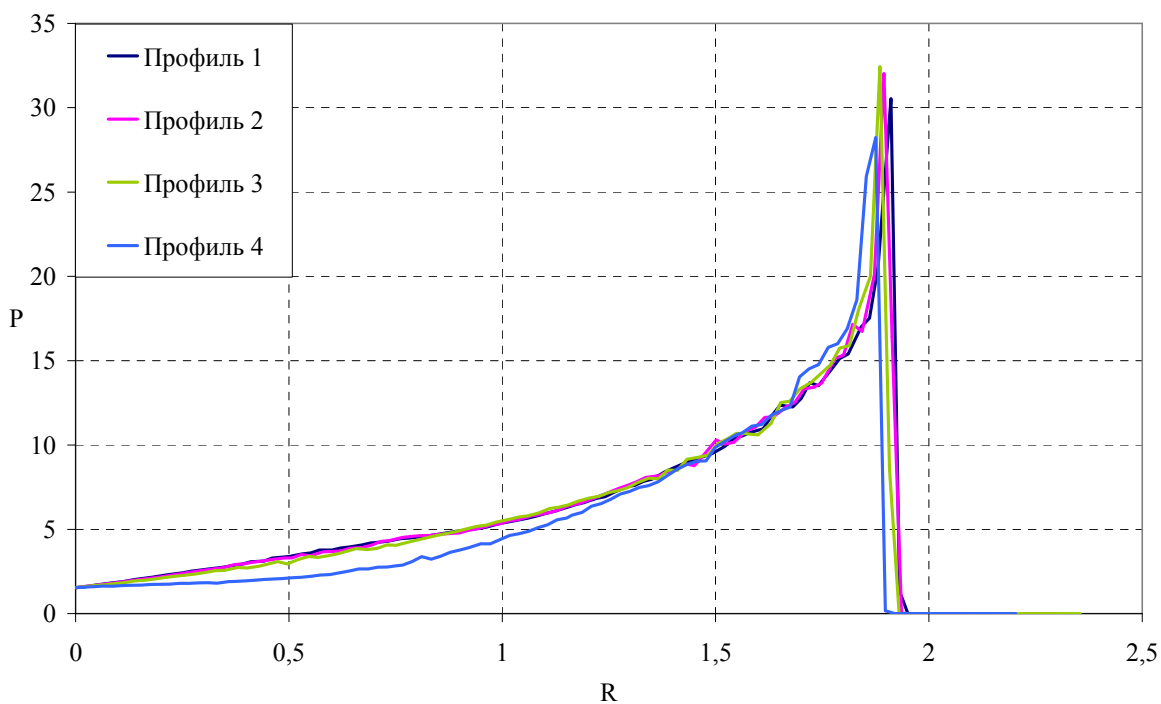


Рис. 14. Профили давления в расчете ММЧ



Конфигурации кривых демонстрируют хорошую сферичность распространяющейся волны. Слабовыраженная асимметричность обусловлена тем, что на границах образца заданы разные граничные условия (жесткая стенка и свободная граница). Тем не менее, в расчете ММЧ фронт волны выражен более четко.

На рис. 15 приведена  $r(t)$ -диаграмма для обоих расчетов.

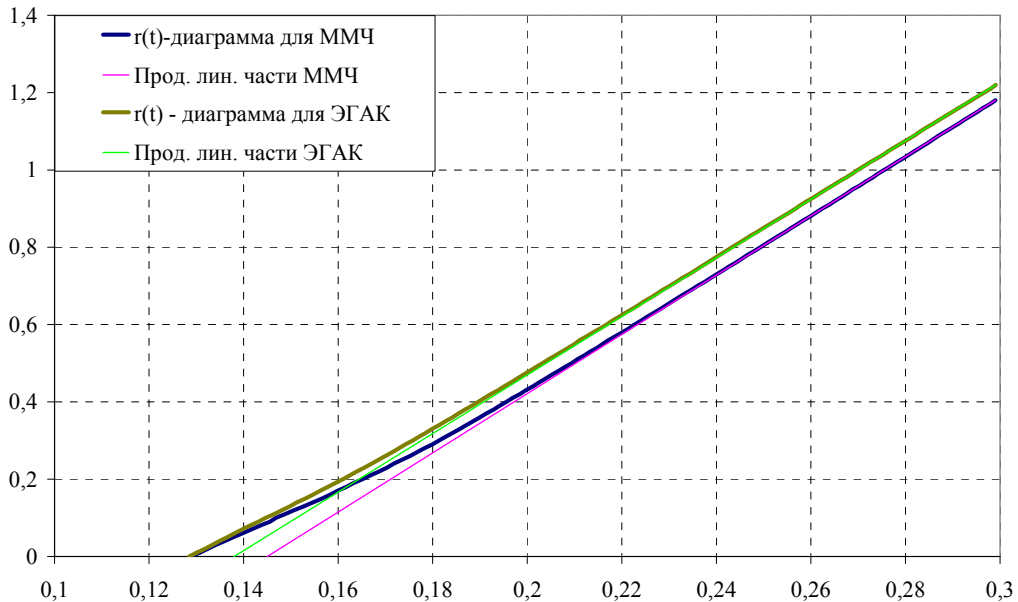


Рис. 15.  $r(t)$  диаграммы для расчетов ММЧ и ЭГАК

Для наглядности на графике приведены продолжения линейных частей  $r(t)$ -диаграмм указанных расчетов. По их наклону можно оценить скорость детонационной волны как  $D \approx 7,6$  для расчета ЭГАК и  $D \approx 7,7$  для расчета ММЧ. Имеет место разница во времени индукции детонации ВВ, которая объясняет разницу в геометрическом положении детонационной волны в расчетах ЭГАК и ММЧ.

**Задача 5. Тест Сви́динского.** Решению данной задачи посвящена отдельная работа В. А. Сви́динского, поэтому в нашей работе ограничимся менее подробным описанием, достаточным для тестирования метода ММЧ. Схема постановки расчетов представлена на рис. 16.

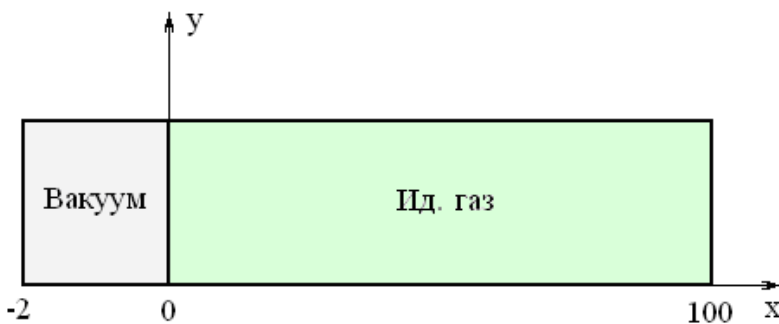


Рис. 16. Геометрия задачи

Геометрия состоит из области длиной 102. Большая часть области занята идеальным газом с параметрами  $\rho_0 = 1$ ,  $e_0 = 0$ , а левая часть занята вакуумом, с помощью которого задается граничное условие (давление на границе).

Расчеты проводились в плоской одномерной постановке на неподвижной сетке с размерами ячейки  $h = 1$ . Частицами описан только идеальный газ с использованием 4 частиц на ячейку в начальный момент времени.

На левой границе идеального газа с помощью вакуума задано условие постоянного давления  $P = 5$ , на правой – вытекающий поток, верхняя и нижняя границы – жесткие стенки.

Уравнения состояния:

- УрС идеального газа с константами  $c_w = 1$ ,  $\gamma = 3$ ;
- УрС вакуума с константой  $P_0 = 5$ .

Для идеального газа задана упругопластическая модель.

Таблица 4

Теоретическое (точное) решение задачи 5

Величина	Упругая область	Пластическая область
$\rho$	1,03389	1,81379
$P_T$	0,69005	5,00000
$P_0$	-0,30995	4,00000
$P$	0,02338	4,33333
$u$	0,15040	1,48923
$D$	4,58819	3,26407

Положение контактной границы между упругой и пластической областями на конечный момент времени  $t = 20$  составляет  $x = 65,2816$ .

В качестве результатов расчета приведем графики плотности на момент времени  $t = 20$ . Сравнение будет проводиться между расчетами методом ММЧ и приведенным выше точным решением.

Стоит отметить, что данная задача чувствительна к выбору величины коэффициента линейной вязкости. Поэтому проведены серии расчетов задачи с вариацией коэффициента в диапазоне от  $k = 0,2$  до  $k = 1$ , которые показали, что в пластической области (за фронтом УВ) численное решение будет приближаться к теоретическому при значениях коэффициента более 0,5. На упругую область (за фронтом упругой волны и до фронта УВ) величина коэффициента линейной вязкости практически не влияет.

На рис. 17 представлены результаты серии расчетов методом ММЧ. В подписи дополнительно указан коэффициент линейной вязкости.

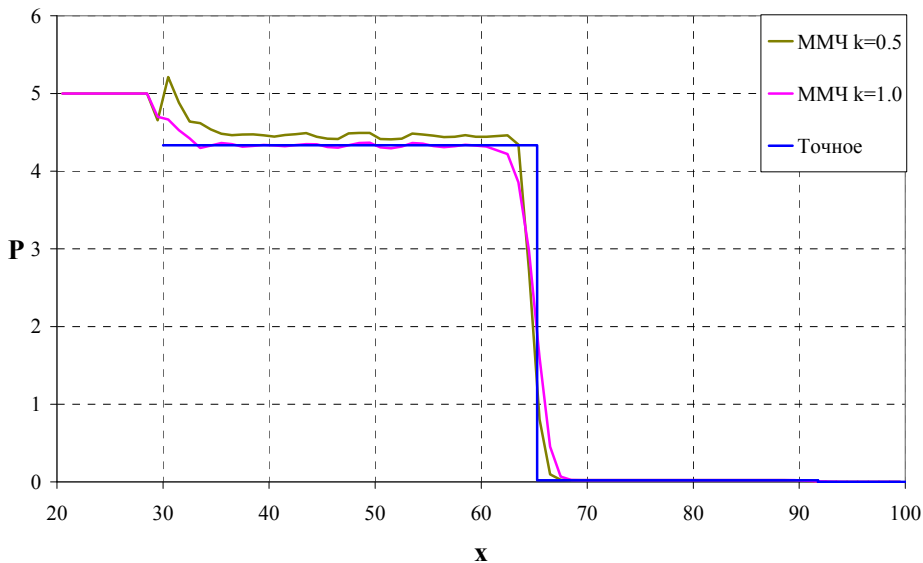


Рис. 17. Профили давления в расчетах ММЧ

Результаты показали приемлемую точность по сравнению с теоретическим решением как в упругой, так и в пластической областях. Кроме того, по мере приближения значения коэффициента линейной вязкости к 1, значения величин за фронтом УВ будут приближаться к точному решению.

**Задача 6. Тест Тейлора.** Подробно задача рассмотрена в работе [9]. Здесь же ограничимся одним из вариантов постановки задачи, взятым из указанной работы. Схема постановки расчетов представлена на рис. 18.

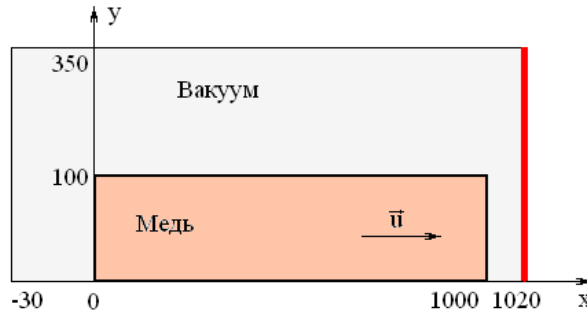


Рис. 18. Геометрия задачи

Геометрия состоит из области размером  $1050 \times 350$ . Медный стержень с размерами  $1000 \times 100$  имеет скорость  $u = \{0,1; 0,28\}$ , направленную вдоль оси  $X$ . Остальное пространство занято вакуумом.

Расчеты проводились в двумерной цилиндрической постановке на неподвижной сетке с размерами ячейки  $h = 5$  см ( $210 \times 70$  ячеек). Частицами описан только медный стержень с использованием 1 частицы на ячейку в начальный момент времени.

Преграда реализована в виде жесткой стенки на правой границе области ( $x = 1020$ ). Ось симметрии ( $y = 0$ ) – нижняя граница – также является жесткой стенкой. Остальные границы ( $x = -30$  и  $y = 350$ ) свободные.

Уравнения состояния:

- для стержня использовано УрС Ми-Грюнаизена;
- вакуум – УрС вакуума.

Для медного стержня задана упругопластическая модель Мизеса.

Проведено четыре расчета. По стандартной схеме ЭГAK со скоростями  $u = 0,1$  и  $u = 0,28$  и методом ММЧ с теми же скоростями стержня. На рис. 19 представлены результаты описанных вариантов решения в виде зависимости длины стержня от времени.

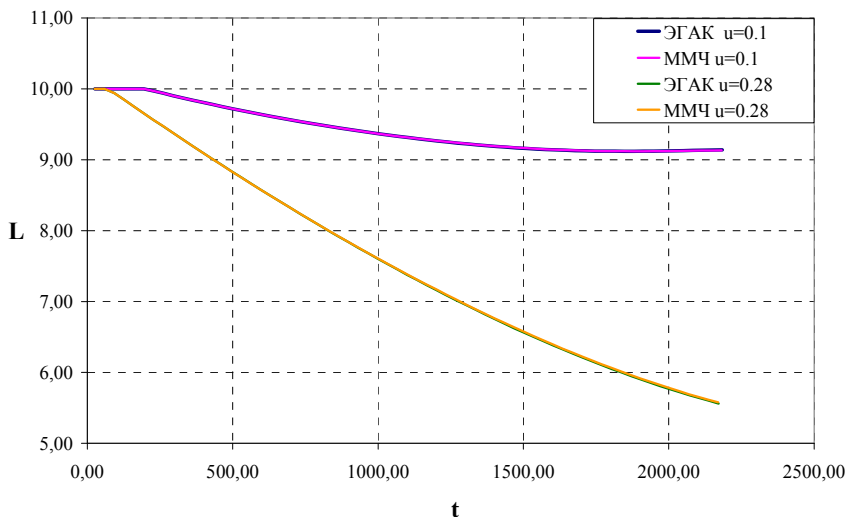


Рис. 19. Зависимость длины стержня от времени

На рис. 20 приведены растровые картины объемных концентраций вещества стержня в окрестности места соударения на момент времени  $t = 2200$ , полученные в расчетах по стандартной методике ЭГАК, и геометрическое расположение частиц в аналогичной окрестности в расчете ММЧ при начальной скорости соударения  $u = 0,28$ .

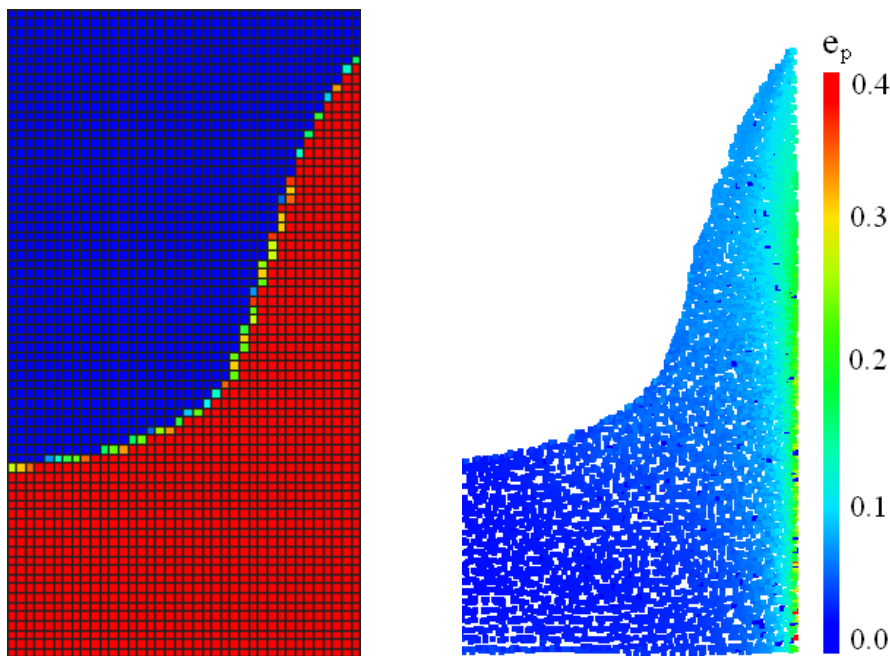


Рис. 20. Сравнение конфигурации стержня в окрестности соударения при  $t = 2200$  в расчетах ЭГАК (слева) и ММЧ (справа)

Исходя из полученных графиков и растровых картин можно утверждать о хорошей точности получаемых по ММЧ численных решений.

## Заключение

В работе представлены особенности реализации монотонного метода частиц для 2D моделирования газодинамических течений с учетом упругопластики и горения ВВ по кинетике МК в рамках методики ЭГАК. Показана работа реализованных программ на тестовых задачах. Сравнение полученных результатов проводилось с результатами выполненных ранее экспериментальных исследований, а также расчетов, сделанных по стандартным программам методики ЭГАК. По результатам расчетов можно утверждать, что процессы упругопластики и горения ВВ по кинетике МК, реализованные в частицах ММЧ, работоспособны и имеют преимущество в сравнении с программами соответствующих процессов методики ЭГАК.

## Литература

1. Бахрах С. М., Глаголева Ю. П., Самигулин М. С., Фролов В. Д., Яненко Н. Н., Янилкин Ю. В. Расчет газодинамических течений на основе метода концентраций // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 3. С. 566–569.
2. Харлоу Ф. Х. Численные методы частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 316–342.

3. Янилкин Ю. В., Шмелев В. А., Колобянин В. Ю., Беляев С. П. Монотонный метод частиц для моделирования двумерных газодинамических течений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 3. С. 3–14.

4. Янилкин Ю. В., Шанин А. А., Ковалев Н. П. и др. Методика ЭГАК для расчетов двумерных течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 4. С. 69–75.

5. Дарова Н. С., Дибиров О. А., Жарова Г. В., Шанин А. А., Янилкин Ю. В. Методика ЭГАК. Лагранжево-эйлерова методика расчета двумерных газодинамических течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 2. С. 51–58.

6. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Куратов С. Е. и др. Теоретическое обоснование феноменологической модели ударно-волновой чувствительности ВВ на основе ТАТБ // Химическая физика. 1995. Т. 14, № 2–3.

7. Морозов В. Г., Дмитриева Л. В., Карпенко И. И., Корепова Н. В. Численное моделирование по методике Д возбуждения детонации в ВВ на основе ТАТБ ударом тонкой летящей пластины // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 2.

8. Торопова Т. А., Янилкин Ю. В. Методика расчета двумерных течений многокомпонентной среды с учетом прочностных свойств среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 4. С. 58–66.

9. Код ЭГИДА-2D для моделирования двумерных задач: Учебное пособие. В 2 томах. Том 1 / Под ред. Ю. В. Янилкина. Саров: ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ», 2008.

## АЛГОРИТМЫ ПОСТРОЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТОК НА ОСНОВЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СЕТКИ ДЛЯ МЕТОДИКИ ТИМ

*А. К. Шмелева, А. А. Воропинов*

Российский Федеральный Ядерный Центр –  
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

При решении трехмерных задач механики сплошной среды в областях сложной формы начальная геометрия часто задается в виде поверхностной сетки, а возмущения в системе – в виде граничных условий. В связи с этим наиболее важно построение качественной расчетной сетки, особенно вблизи границ. В данной работе описаны два подхода к построению трехмерных неструктурированных сеток на основе поверхностной сетки, реализованные в рамках методики ТИМ [1]:

1. Построение сетки приграничного слоя.
2. Построение сетки на основе диаграммы Вороного с расстановкой центров от поверхности.

### Построение сетки приграничного слоя

Для построения каждого слоя требуется определять положение новых узлов сетки при заданном отступе  $h$ . Для этого для каждого узла поверхностной сетки  $Vert_i$  делается смещение на величину  $h_i = h\delta_i$  по направлению нормали узла. Здесь используется коэффициент сдвига узла  $\delta_i$  – величина, определяющая, на какое расстояние переместится новый узел относительно положения