

УДК 519.6

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СЧЕТНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА ВЗРЫВЧАТОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ВВ ПО КИНЕТИКЕ МК В МЕТОДИКЕ ЛЭГАК

Н. А. Володина, И. Ю. Мышкина, В. Ф. Спиридонов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

При численном моделировании процесса развития и распространения детонации по методике ЛЭГАК отработана технология проведения расчетов с кинетикой МК на лагранжево-эйлеровых сетках. Изучено поведение результатов расчетов с кинетикой МК на последовательно сгущающихся сетках. Исследовано влияние на численное решение временного шага, типа счетной квадратичной вязкости, алгоритма расчета термодинамических параметров смешанных ячеек.

Проведено исследование по уточнению параметров модели кинетики МК для ВВ типа ТАТБ. Приводятся результаты расчетов одномерных и двумерных задач, а также их сравнение с экспериментальными данными, полученными в ИФВ ВНИИЭФ.

Ключевые слова: методика ЛЭГАК, кинетическая модель детонации МК, уравнение состояния ВВ.

Введение

Модель кинетики детонации МК [1, 2], разработанная группой авторов под руководством В. Г. Морозова, широко используется при численном моделировании процессов взрывчатого разложения ВВ по методике ЛЭГАК [3, 4]. Одной из особенностей кинетики детонации МК является зависимость выгорания ВВ от давления и плотности на фронте ударной волны (УВ). В силу тех или иных особенностей разностных схем (способ выделения ударного скачка, дисперсионные и диссипативные свойства и т. д.), используемых в различных численных методиках, некоторые параметры кинетики, особенно отвечающие за вычисление выгорания на фронте, зависят от счетных параметров — размера сетки, временного шага, счетной вязкости и т. д.

Первоначально в методике ЛЭГАК параметры кинетики МК были подобраны для расчетов на счетных сетках из достаточно узкого диапазона в силу ограниченности ресурсов ЭВМ. Обычно размер стороны счетной ячейки составлял $h \approx 0,02 \div 0,01$ см. Временной шаг вырабатывался внешними по отношению к кинетике моделями (условие Куранта в газовой динами-

ке, условие на УВ и т. д.). В настоящий момент вычислительные ресурсы позволяют проводить расчеты на достаточно подробных счетных сетках ($h \approx 0,005 \div 0,001$ см), поэтому встал вопрос об исследовании поведения решения в расчетах с кинетикой МК на последовательно сгущающихся сетках.

Необходимо отметить особенности реализации кинетики МК в методике ЛЭГАК:

- использование в расчетах лагранжево-эйлеровых и эйлеровых сеток;
- возможность использования однокомпонентного и двухкомпонентного приближений для реагирующей смеси.

В настоящей работе особое внимание уделяется следующим важным вопросам:

- исследование зависимости получаемого решения от размера счетной сетки по пространству и по времени, определение максимально допустимых пространственного и временного шагов (значения шагов, при уменьшении которых результаты расчетов перестают меняться);
- влияние замыкающего соотношения в *смешанных* ячейках при распределении сжа-

тий компонентов для реагирующей смеси на лагранжевом этапе (двухкомпонентный подход);

- сопоставимость результатов расчетов на эйлеровой и лагранжевой сетках.

Исследование этих вопросов позволило выработать технологию проведения расчетов и дать рекомендации по выбору размера сетки, типа квадратичной вязкости, временного шага и т. д. при численном моделировании процессов детонации с кинетикой МК в комплексе программ ЛЭГАК.

Краткое описание модели кинетики детонации МК

В работе [1] приведено подробное описание модели кинетики МК, а в работе [2] приведено описание ее реализации в методике ЛЭГАК. Остановимся лишь на тех особенностях модели кинетики, которые необходимы при проведении исследований в данной работе.

Модель кинетики МК можно считать двухстадийной, так как часть слагаемых, входящих в уравнение для скорости реакции, отвечает за выгорание ВВ на фронте УВ, а остальные — за ее фронт. Первая стадия отвечает за формирование инициирующей УВ. На этой стадии определяется степень разложения ВВ; по окончании первой стадии она фиксируется и становится начальной степенью разложения ВВ для второй стадии.

Для методик, использующих алгоритмы *сквозного счета* УВ (в которых вводится счетная вязкость, приводящая к замене ударного разрыва плавным переходом), в том числе для методики ЛЭГАК, существует проблема явного выделения фронта УВ. Таким образом, из-за необходимости локализации невыделенных явно ударных разрывов и определения скачка давления возникает проблема адаптации кинетики МК к конкретной численной методике.

В силу двухстадийности кинетики МК необходимо для каждой счетной ячейки хранить признак фронта УВ, выгорание на фронте УВ и общее выгорание. В связи с этим в расчетах на лагранжево-эйлеровых и чисто эйлеровых сетках требуется переинтерполяция указанных величин при перестроении счетной сетки.

Для адекватного описания взрывчатого превращения в зоне химической реакции необходимо, чтобы на эту зону приходилось как минимум

5–10 счетных ячеек. Так, например, для ВВ на основе ТАТБ ширина зоны химической реакции в стационарной детонационной волне составляет ~ 1 мм, а для ВВ на основе октогена эта зона может составлять всего лишь 0,1 мм. То есть счетная сетка в зоне ВВ может зависеть от типа моделируемого ВВ и должна быть достаточно мелкой. Однако, с другой стороны, размер счетной сетки должен быть таким, чтобы обеспечивать проведение численного моделирования за разумные временные сроки. Таким образом, для моделей кинетики МК, как и для большинства других моделей детонации, выбор счетной сетки является актуальной задачей.

Введение ограничения на временной шаг

Расчеты, проведенные по методике ЛЭГАК с использованием кинетики МК, показали, что при численном моделировании процесса детонации ВВ важен размер как пространственного шага, так и временного.

Результаты численного исследования получены на задаче об инициировании ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ высотой 0,6 см. На рис. 1,а приведена начальная постановка расчета. Расчет проводился в плоской постановке на квадратной эйлеровой сетке. Пашка из высокочувствительного ВВ инициировалась в точке на оси слева. Процесс детонации рассчитывался в приближении идеальной детонации. Процесс взрывчатого превращения в ВВ типа ТАТБ моделировался с использованием кинетики детонации МК. На рис. 1,б приведен экспериментальный рентгено снимок из работы [2], демонстрирующий размер и форму прореагировавшей части ВВ.

При проведении расчетов на последовательных измельченных пространственных сетках было обнаружено увеличение зоны выгоревшего ВВ при уменьшении размера сетки h . Это хорошо видно, например, на задаче об инициировании ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ (рис. 2, см. также цветную вкладку).

Аналогичная ситуация наблюдается при уменьшении временного шага на фиксированной по размеру пространственной сетке. При этом чем больше размер ячейки, тем сильнее влияние временного шага.

На рис. 3 (см. также цветную вкладку) приведена зависимость зоны выгорания от размера временного шага для той же задачи на сетке с

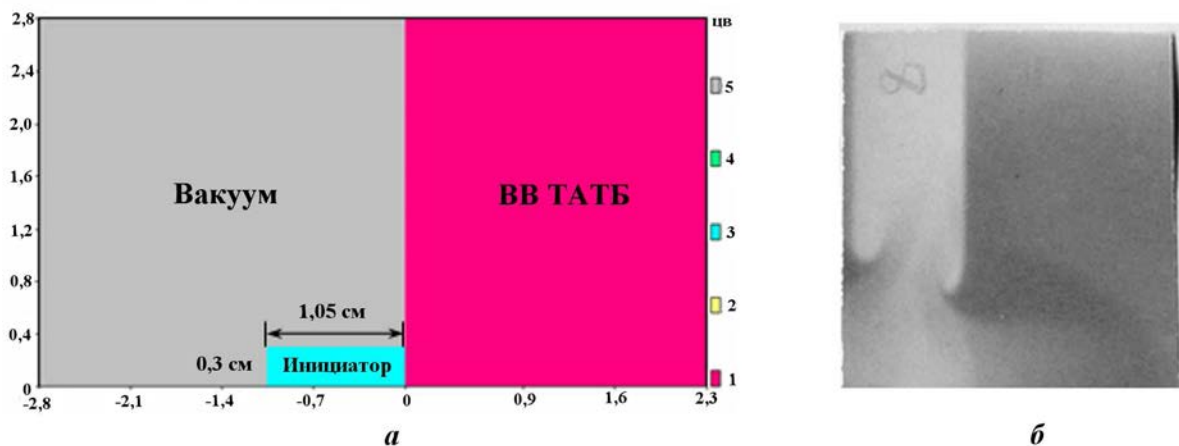


Рис. 1. Начальная постановка расчета (а) и рентгеноснимок эксперимента (б) по иницированию ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ с поперечным размером 0,6 см

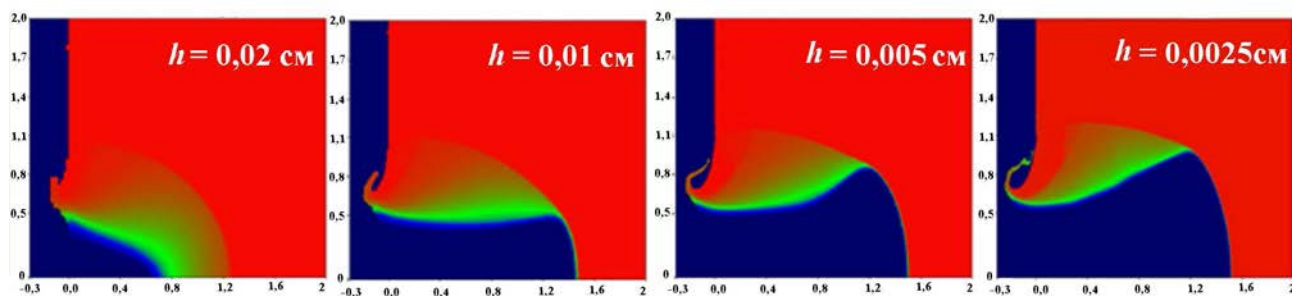


Рис. 2. Зависимость зоны выгорания ВВ от размера пространственной сетки h

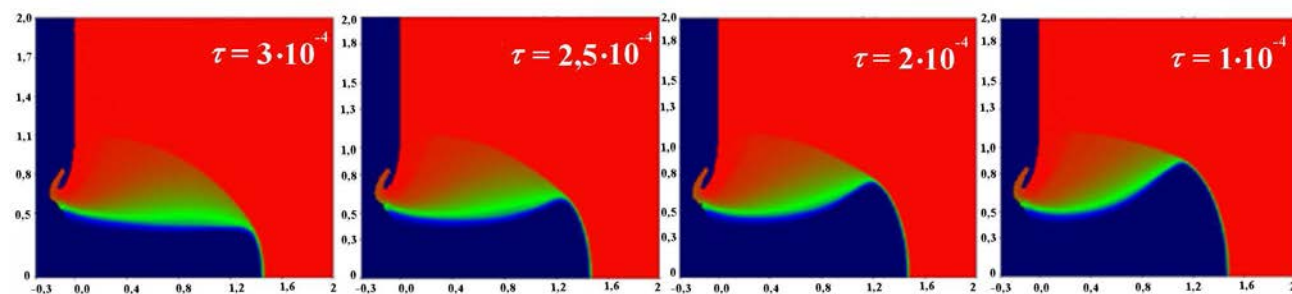


Рис. 3. Зависимость зоны выгорания ВВ от временного шага τ на пространственной сетке с $h = 0,01$ см

$h = 0,01$ см. Как видно из рисунка, при достижении определенного временного шага зона выгорания практически перестает меняться. Также расчеты показали, что при измельчении ячеек счетной сетки зависимость от временного шага начинает исчезать.

Эти факты указывают на то, что необходимо введение ограничения на временной шаг в расчетах с кинетикой МК функционально связанного с моделируемым процессом взрывчатого превращения.

Было опробовано два вида ограничения временного шага:

- 1) за счет ограничения выгорания ВВ на счетном шаге:

$$\tau_{new} = k_{\delta} \tau_{old} \frac{\delta}{\Delta W} \quad \text{при } \Delta W > \delta, \quad (1)$$

где τ_{new} — новое значение шага по времени; τ_{old} — старое значение шага по времени; k_{δ} — корректировочный коэффициент; δ — ограничитель роста выгорания ВВ; ΔW — изменение концентрации ВВ на одном шаге за счет кинетики. Если, например, $\delta = 0,04$,

то это означает, что за один временной шаг выгорание не должно превышать 4 %;

- 2) типа условия Куранта, когда шаг зависит от скорости нормальной детонации и имеет следующий вид:

$$\tau \leq k_D \frac{h}{D}, \quad (2)$$

где h — характерный размер ячейки; D — скорость нормальной детонации ВВ; k_D — корректировочный коэффициент. Если, например, $k_D = 0,5$, то при данном алгоритме обеспечивается прохождение ячейки детонационной волной не менее чем за два временных шага.

Для того чтобы выбрать, какой алгоритм ограничения на временной шаг предпочесть в расчетах с кинетикой МК, была проведена серия расчетов двух типов задач: расчета кривой Пополато и иницирования ВВ типа ТАТБ пашками из высокочувствительного ВВ с различными размерами поперечного сечения. В расчетах для каждого размера пространственной счетной сетки проводилась серия расчетов с постоянным шагом по времени. Временной шаг уменьшался от допустимых значений (из условия устойчивости газодинамической схемы) до значений, при которых результаты расчетов практически не меняются. Исследования проводились для квадратной эйлеровой сетки со стороной h (0,01 ÷ 0,001 см).

По совокупности всех расчетов для каждого размера счетной сетки выбирался максимально допустимый временной шаг, т. е. шаг, при дальнейшем уменьшении которого результаты расчетов не меняются. На рис. 4 представлена полученная зависимость максимально допустимого временного шага от размера счетной сетки.

Затем были подобраны параметры для обоих алгоритмов выбора счетного шага (в соответствии с ограничениями (1) и (2)) таким образом, чтобы при $h = 0,001$ см был получен ограничитель $\tau_{kin} = 0,2 \cdot 10^{-4}$ [10 мкс]. Так, для алгоритма выбора шага по выгоранию (формула (1)) было получено $\delta = 0,04$, а для алгоритма выбора шага по скорости детонации (формула (2)) было получено $k_D = 0,25$.

На рис. 4 приведены графики зависимости $\tau(h)$ для обоих алгоритмов расчета шага. Из рисунка видно, что алгоритм выбора шага типа курантовского (будем обозначать этот шаг

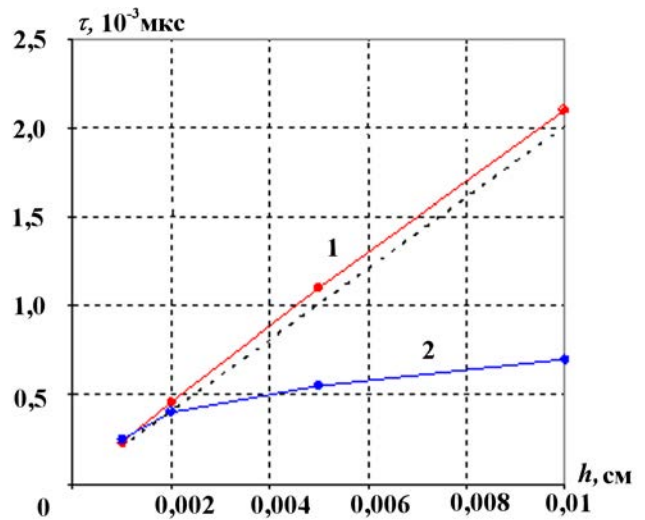


Рис. 4. Зависимость временного шага τ от пространственного h для расчетов с кинетикой МК: 1 — $\tau < 0,25h/D$; 2 — ограничение выгорания с $\delta = 0,04$; - - - — по совокупности расчетов ($\tau \sim 0,02h$)

$\tau(h, D)$) практически обеспечивает совпадение с подобранной зависимостью, а алгоритм выбора шага по выгоранию ($\tau(h, \delta)$) занижает его. Хотя алгоритм выбора счетного шага $\tau(h, \delta)$ целиком лежит в области допустимых счетных шагов и, возможно, является более правильным, но поставленная цель — выбрать максимально допустимый счетный шаг, и алгоритм выбора $\tau(h, D)$ полностью удовлетворяет принятым критериям. Дальнейшие расчеты показали применимость этого алгоритма.

На рис. 5 (см. также цветную вкладку) приведены результаты расчетов иницирования ВВ типа ТАТБ пашкой из высокочувствительного ВВ с поперечным размером 0,6 см на последовательно измельчаемых пространственных сетках с использованием критерия ограничения счетного шага $\tau(h, D)$. Из рисунка видно, что при измельчении счетной сетки, начиная с $h = 0,01$ см, зона выгорания практически не меняется.

Выбор вида счетной квадратичной вязкости

Стандартно при проведении двумерных расчетов по методике ЛЭГАК для сквозного счета УВ используется квадратичная счетная вязкость Неймана—Рихтмайера

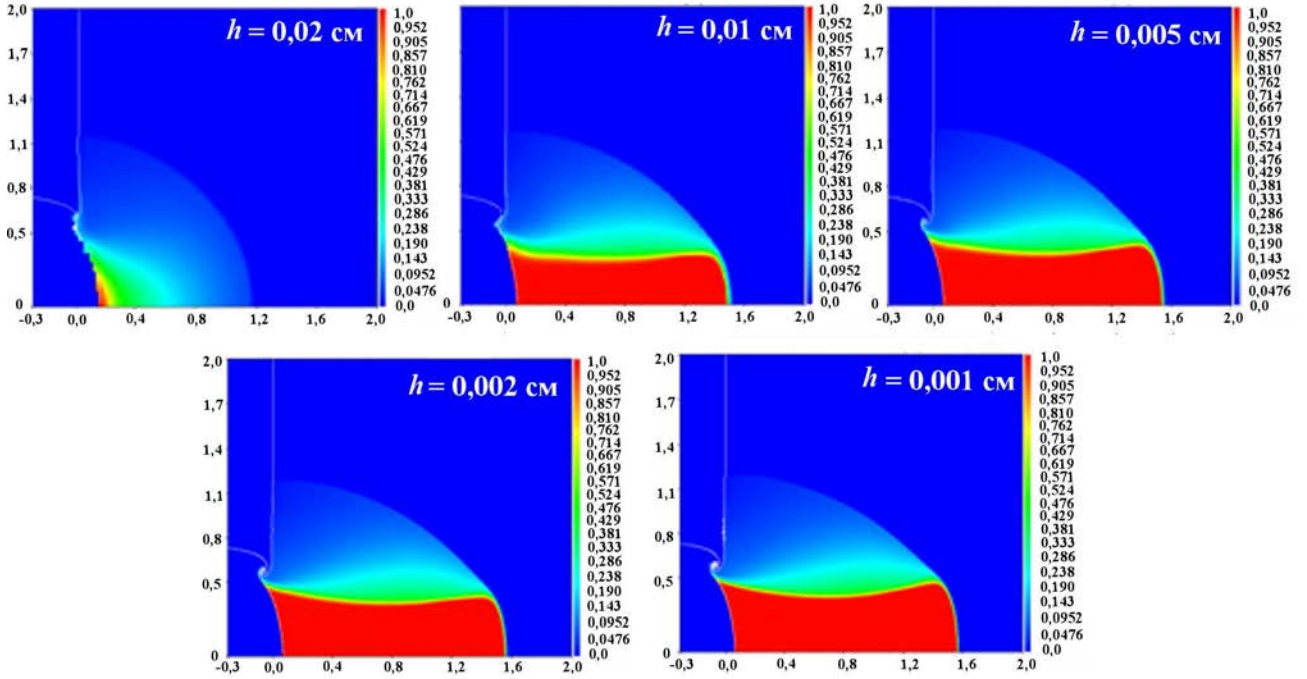


Рис. 5. Зависимость зоны выгорания ВВ от размера пространственной сетки h в расчете с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером

$$g = \begin{cases} \mu h^2 \frac{1}{\rho} \left(\frac{d\rho}{dt} \right)^2, & \text{если } \frac{d\rho}{dt} > 0; \\ 0, & \text{если } \frac{d\rho}{dt} \leq 0, \end{cases} \quad (3)$$

где h — характерный размер ячейки счетной сетки; μ — коэффициент, отвечающий за ширину зоны размазывания ударного скачка.

В методике ЛЭГАК разностная аппроксимация выражения (3) имеет вид

$$g = \begin{cases} \frac{\mu h^2 \rho^{n+1} (\rho^{n+1} - \rho^n)^2}{\rho^n (\rho^{n+1} + \rho^n)}, & \text{если } \rho^{n+1} > \rho^n; \\ 0, & \text{если } \rho^{n+1} \leq \rho^n; \end{cases} \quad (4)$$

в двумерном случае характерный размер ячейки определяется следующим образом:

$$h = S \sqrt{\frac{2}{l_1^2 + l_2^2}}, \quad (5)$$

где S — площадь ячейки, l_1 и l_2 — диагонали ячейки.

Использование такого вида квадратичной вязкости, например, в расчетах трехмерных задач приводит к нарушению симметрии сферических

течений на сферических сетках, так как характерный размер в пределах одного и того же сферического слоя не одинаков.

В расчетах с кинетикой МК на эйлеровой прямоугольной сетке (когда детонационная волна распространяется не ортогонально счетной сетке) также возникли проблемы при использовании неймановской вязкости (4) с выбором характерного размера по формуле (5). Они связаны с тем, что данный характерный размер ячейки не зависит от направления движения среды.

Так, используя неймановскую счетную вязкость, не удавалось подобрать параметры кинетики (A_0 и b , отвечающие за выгорание ВВ на фронте УВ) таким образом, чтобы зона выгорания в расчетах с инициирующей шашкой, $L = 0,6$ см, получалась близкой к затухающей. При измельчении счетной сетки ВВ типа ТАТБ начинало разгораться (рис. 6, см. также цветную вкладку). В расчетах с двухкомпонентной моделью для реагирующей смеси этот эффект проявлялся еще более ярко (рис. 7). Из рис. 7 видно, что вдоль оси симметрии детонация затухла, а под углом $\sim 45^\circ$ по диагонали ВВ горит.

Решение этой проблемы применительно к расчетам детонации — в использовании векторных квадратичных вязкостей, которые не зави-

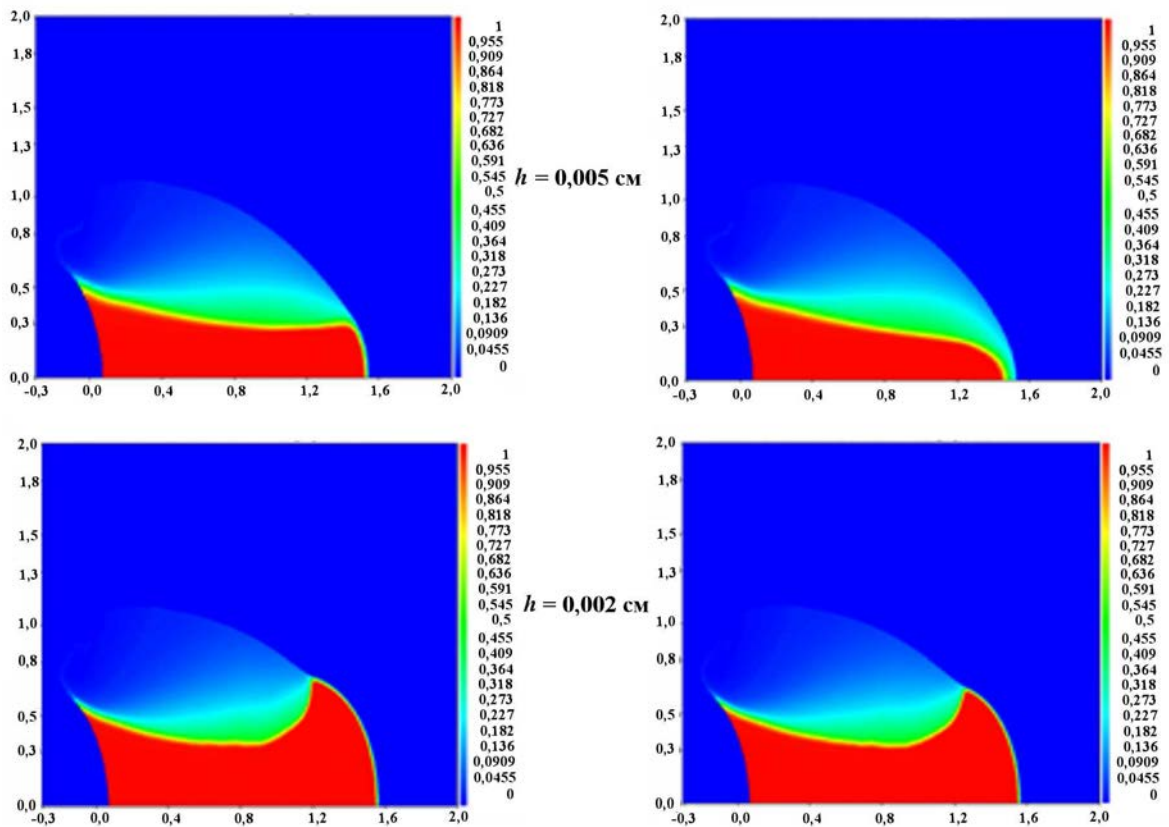


Рис. 6. Зоны выгорания ВВ в расчетах с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и неймановской квадратичной счетной вязкости: слева — $A_0 = 11,8$; справа — $A_0 = 11,7$

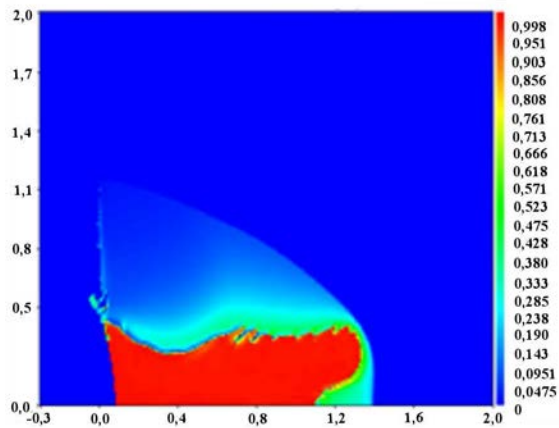


Рис. 7. Зоны выгорания ВВ в расчете с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и неймановской квадратичной счетной вязкости (двухкомпонентная модель для реагирующей смеси)

сят от характерного размера [5], либо *ориентированной* вязкости¹[6].

Были проведены серии тестовых расчетов с

¹Неймановская вязкость с ориентированным характерным размером, который вычисляется по деформациям ячейки в трех взаимноортогональных направлениях.

обоими типами квадратичных вязкостей (векторной и ориентированной), которые дали практически идентичные результаты. Однако по всей совокупности расчетов наилучшим образом зарекомендовала себя ориентированная вязкость, поэтому в дальнейших расчетах с кинетикой было решено использовать именно ее.

На рис. 5 приведены расчеты с иницирующей пашкой, $L = 0,6$ см, на последовательно сгущающихся сетках. Хорошо видно, что с использованием ориентированной вязкости, начиная с $h = 0,01$ см, зона выгорания ВВ ПБС практически не меняется.

Особенности реализации кинетики МК для расчетов на лагранжево-эйлеровой сетке

Однокомпонентная модель для реагирующей смеси. Стандартно в расчетах по методике ЛЭГАК с кинетикой МК для реагирующей смеси используется однокомпонентная модель [2]. По сути смесь ВВ + ПВ² является одним веществом, которое характеризуется дополнительным параметром W — концентрацией ВВ в реагирующей смеси. Такая модель называется *однокомпонентной*, ВВ и ПВ имеют общие термодинамические характеристики: плотность ρ , внутреннюю энергию e . Таким образом, в случае однокомпонентной среды уравнение состояния для реагирующего вещества (с учетом кинетики) является функцией трех независимых переменных ρ , e , W и давление для смеси ВВ и ПВ можно представить в следующем виде:

$$P = P(\rho, e, W) = WP_{ВВ}(\rho, e) + (1 - W)P_{ПВ}(\rho, e),$$

где $WP_{ВВ}(\rho, e)$ — вклад давления ВВ; $(1 - W) \times P_{ПВ}(\rho, e)$ — вклад давления ПВ.

При использовании такой модели для описания реагирующей среды для кинетики МК необходимо хранить три дополнительные (по отношению к газодинамическим) величины: W — концентрацию ВВ в реагирующей смеси; R_{ij} — признак фронта УВ; Φ_0 — выгорание ВВ на фронте первой УВ. Это связано с тем, что кинетика МК является двухстадийной и при расчете концентрации ВВ (W) необходимо выделять фронт УВ, т. е. различать ячейки, по которым идет УВ, и ячейки, расположенные за фронтом УВ, а также вычислять выгорание на фронте УВ (Φ_0), которое потом используется при вычислении выгорания за фронтом УВ.

Если расчет ведется на лагранжевой сетке, то никаких трудностей (кроме выделения фронта УВ и вычисления выгорания на этом фронте) больше не возникает, однако методика ЛЭГАК является лагранжево-эйлеровой и вещество в

различных состояниях (в частности, с признаком фронта УВ) может "перетекать" из одной ячейки в другую на эйлеровом этапе вычисления. В этом случае на эйлеровом этапе необходимо производить пересчет дополнительных величин кинетики, так как они связаны с веществом, а не с пространством. Массивы концентрации ВВ (W), выгорания ВВ на первой УВ (Φ_0) и признака первой УВ (R_{ij}) пересчитываются *на единицу массы вещества*, характеризующего реагирующую смесь.

Двухкомпонентная модель для реагирующей смеси. Наряду с однокомпонентной моделью для реагирующей среды в комплексе программ ЛЭГАК реализована и двухкомпонентная модель. В этом случае уравнение состояния для реагирующего вещества является функцией пяти независимых переменных: $\rho_{ВВ}$, $\rho_{ПВ}$, $e_{ВВ}$, $e_{ПВ}$, $\alpha_{ВВ}$ (или $\alpha_{ПВ} = 1 - \alpha_{ВВ}$). Тогда $\alpha_{ВВ}$ имеет смысл W , где $\alpha_{ВВ}$ — массовая концентрация ВВ. Давление для смеси ВВ и ПВ можно представить в следующем виде:

$$P = P(\rho_{ВВ}, \rho_{ПВ}, e_{ВВ}, e_{ПВ}, \alpha_{ВВ}) = \alpha_{ВВ}P_{ВВ}(\rho_{ВВ}, e_{ВВ}) + (1 - \alpha_{ВВ})P_{ПВ}(\rho_{ПВ}, e_{ПВ}).$$

При использовании двухкомпонентной среды для описания реагирующей смеси, на первый взгляд, возникает ряд преимуществ.

Во-первых, не нужно хранить дополнительную величину — выгорание для вычисления W , так как его заменяет концентрация ВВ — $\alpha_{ВВ}$. Также если, например, ввести дополнительные вещества для выделения реагирующей смеси на фронте УВ ($ВВ_1 + ПВ_1$), а реагирующую смесь за фронтом выделять другой парой веществ ($ВВ_2 + ПВ_2$), как это сделано в методике ЭГАК (код ЭГИДА-2D [7]), то отпадает необходимость в массиве признака R_{ij} положения фронта УВ. Таким образом, использование двухкомпонентной модели среды (разделение ВВ и ПВ на отдельные вещества) позволяет для кинетики МК использовать лишь одну дополнительную величину W_0 для запоминания выгорания на фронте первой УВ.

Во-вторых, для правильного описания переходных процессов в ВВ необходимо учитывать упругопластические свойства ВВ, в то время как для ПВ следует использовать газодинамическое приближение. В однокомпонентной модели это сделать крайне затруднительно, так как ВВ и ПВ являются по сути одним веществом.

²ПВ — продукты взрыва.

Однако наряду с преимуществами есть и ряд недостатков.

Во-первых, в методике ЛЭГАК для многокомпонентной среды на лагранжевом этапе стандартно используется модель относительной равносжимаемости компонентов. Однако известно, что эта модель является физически неверной в обширных смесевых областях (характерных как раз для переходных детонационных процессов) и ее следует применять лишь для течений с ярко выраженными контактными границами. Следовательно, для расчета процесса детонации более логично использовать модель равенства давлений [8]. К тому же авторы модели кинетики детонации МК утверждают, что процесс формирования *горячих пятен* происходит в предположении выравненного давления. Когда ВВ и ПВ рассчитываются в газодинамическом приближении, никаких проблем не возникает. Однако для более точного описания процессов, происходящих в ВВ, необходимо учитывать упругопластические свойства ВВ. В этом случае не совсем ясно, как использовать модель выравнивания давлений (возможно, будет достаточно выравнивать шаровую часть полного тензора напряжений, а девиаторную не изменять; возможно, необходимо выравнивать полные напряжения компонентов).

Далее, в расчетах по стандартной технологии в методике ЛЭГАК принят следующий алгоритм пересчета скоростей на эйлеровом этапе [9]: скорости при расчете конвективных потоков импульса центрируются всегда, за исключением смешанных ячеек и их окрестностей. То есть для смешанных ячеек (где непосредственно "работает" кинетика детонации) всегда используются донорные потоки импульса (аппроксимация с первым порядком). В расчетах это приводит к тому, что выгорание на эйлеровой сетке с $h = 0,01$ см (рис. 8,з) существенно ниже, чем на лагранжевой сетке с тем же размером ячеек (рис. 8,в), хотя для однокомпонентного приближения расчеты на лагранжевой (рис. 8,а) и эйлеровой (рис. 8,б) сетках, начиная с $h = 0,01$ см, практически совпадают.

Оказалось, что аналогичное совпадение результатов можно получить и для двухкомпонентной среды (рис. 9,а,б, см. также цветную вкладку), если при пересчете скоростей на эйлеровом этапе использовать алгоритм, при котором *скорости центрируются всегда* [9].

Из рис. 9,б также видно, что при использовании донорно-акцепторного алгоритма (метод

концентраций) зона смеси ВВ + ПВ имеет ровную зубчатую границу. Этот алгоритм включает в себя анализ вытекания веществ, который препятствует распространению смеси и обеспечивает локализацию контактных границ. Вообще это является положительным свойством алгоритма при расчете задач с ярко выраженными контактными границами, однако в расчетах течений со смесями это может приводить к *самолкализации* контактных границ (сепарации зоны смеси). Одним из способов решения этой проблемы является рассмотрение реагирующей смеси при анализе вытекания как одной компоненты, как, например, это сделано в работе [7]. Таким образом, для ячеек, в которых присутствуют вещества ВВ + ПВ, анализ вытекания для реагирующей смеси не делается. На рис. 9,в приведено поле выгорания ВВ с использованием *модифицированного алгоритма вытекания*. Хорошо видно, что зона перехода из ВВ в ПВ стала ровной и гладкой.

Сравнение двухкомпонентных моделей с разными замыкающими соотношениями для реагирующей смеси. Для сравнения деятельности двух видов замыкающих соотношений (равносжимаемость и выравнивание давлений) применительно к реагирующей среде в расчетах с кинетикой МК проведена серия расчетов по моделированию процесса детонации в ВВ на основе ТАТБ, инициированного шашкой из высокочувствительного ВВ размером 6 мм, на последовательно сгущающихся сетках (рис. 10, см. также цветную вкладку).

Из рис. 10 видно, что результаты расчетов с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением *равносжимаемость* согласуются с экспериментальными данными и лагранжевыми расчетами на сетке $h = 0,005$ см, однако при измельчении счетной сетки происходит существенное уменьшение зоны полностью прореагировавшего ВВ. Возможно, это является подтверждением некорректности модели равносжимаемости для обширных смесевых зон.

Результаты расчетов на эйлеровой сетке с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением при определении сжатий компонентов на основе равенства давлений практически не изменяются, начиная с $h = 0,005$ см. Это свидетельствует о применимости данной модели для расчетов с кинетикой МК.

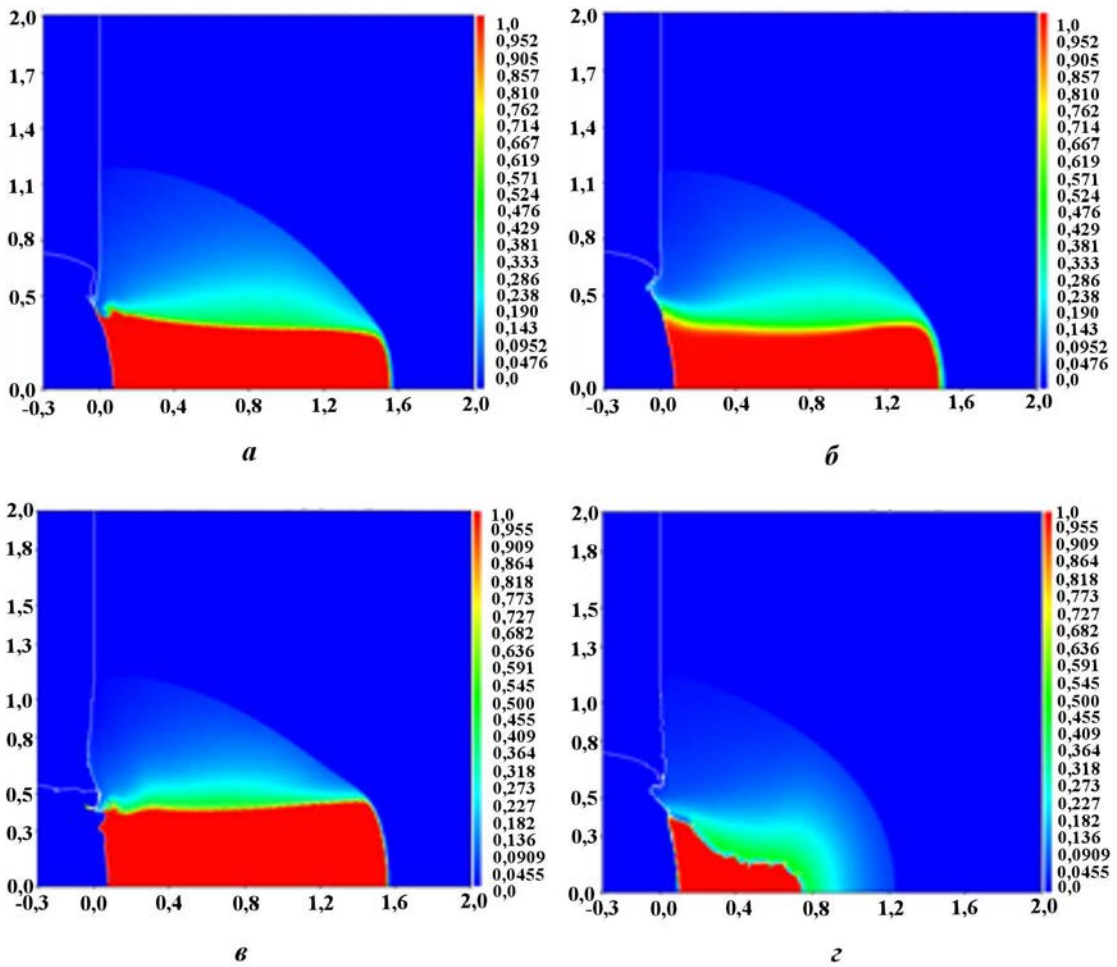


Рис. 8. Зоны выгорания ВВ в расчетах с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером; $h = 0,01$ см: *a* — лагранжева сетка, однокомпонентная модель; *b* — эйлерова сетка, однокомпонентная модель; *v* — лагранжева сетка, двухкомпонентная модель (равносжимаемость); *z* — эйлерова сетка, двухкомпонентная модель (равносжимаемость)

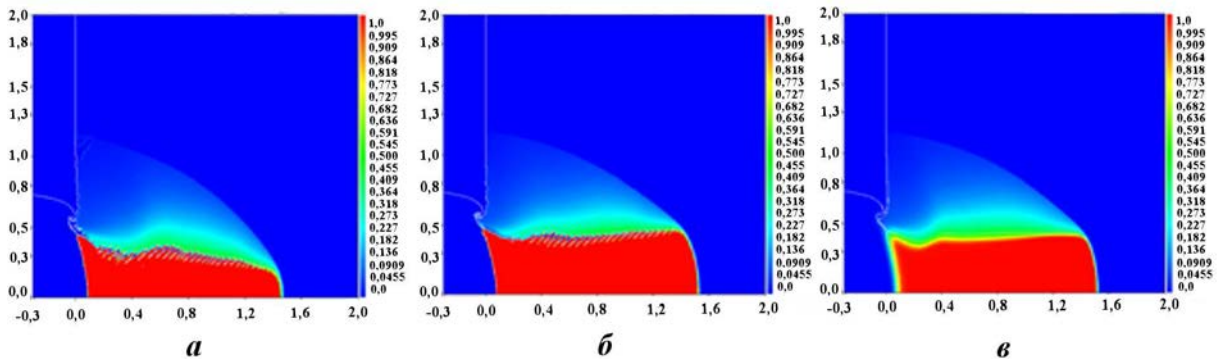
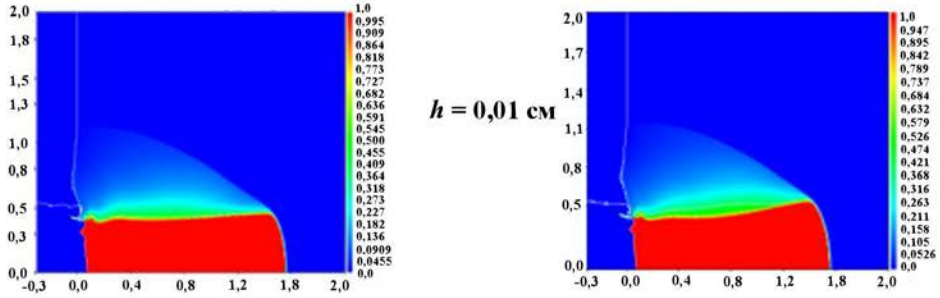


Рис. 9. Зоны выгорания ВВ в расчетах с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером; $h = 0,005$ см, эйлерова сетка, двухкомпонентная модель (равносжимаемость): *a* — центрирование потоков всегда, за исключением смешанных ячеек и их окрестностей; *b* — центрирование потоков; *v* — центрирование потоков, модифицированный метод с отключением анализа вытекания для смеси ВВ + ПВ

Лагранжева сетка



Эйлерова сетка

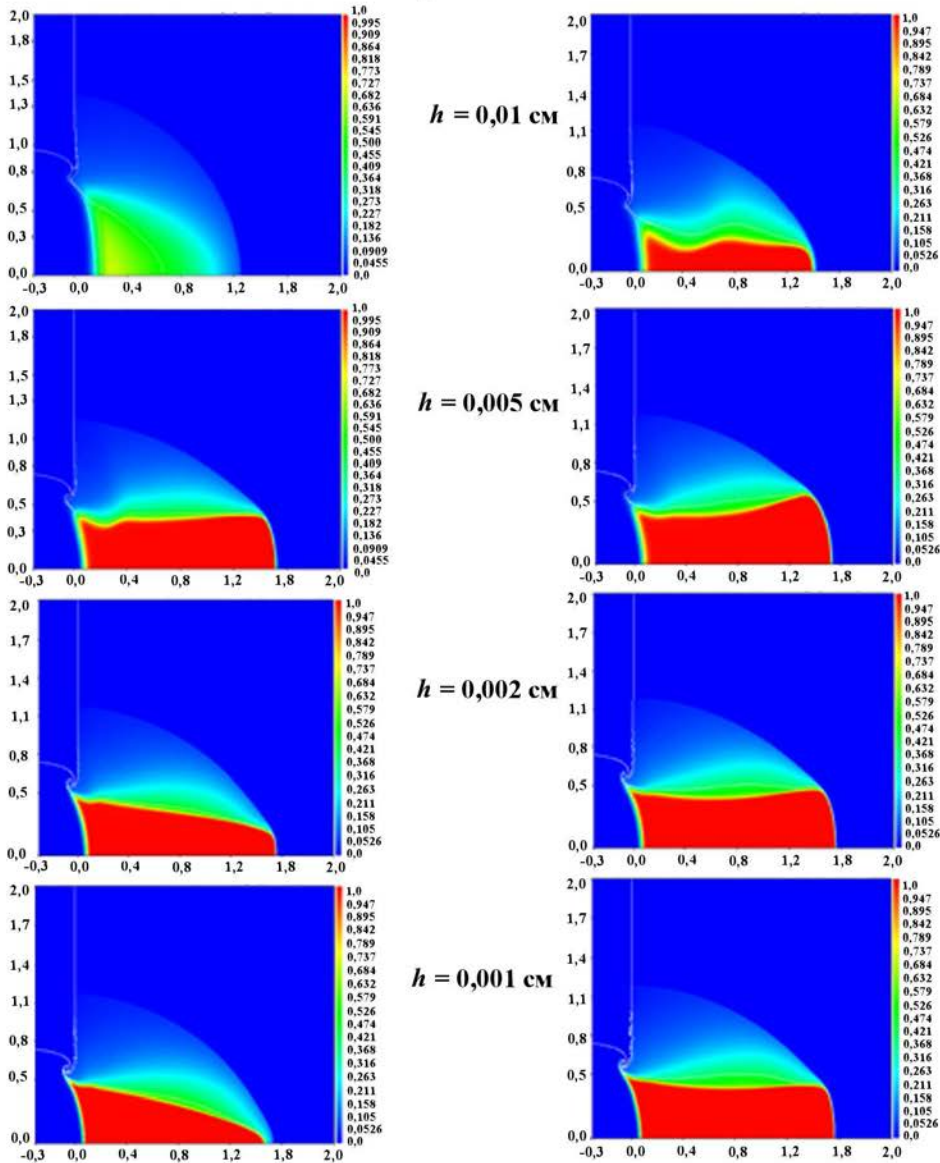


Рис. 10. Зависимость зоны выгорания ВВ от размера пространственной сетки h в расчете с использованием ограничителя на временной шаг типа курантовского с $k_D = 0,25$ и квадратичной счетной вязкости с ориентированным характерным размером в двухкомпонентном приближении: слева — равносжимаемость; справа — выравнивание давлений

О сравнимости результатов расчетов на лагранжевой и эйлеровой сетках

Из результатов расчетов, приведенных в данной работе, а также из опыта, накопленного авторами статьи можно сделать следующие выводы:

1. Расчеты с однокомпонентной моделью среды на эйлеровой сетке качественно описывают экспериментальные данные и согласуются с лагранжевыми расчетами, начиная с $h = 0,01$ см, хотя для достаточно интенсивных нагрузений допускается использование сеток с размером стороны ячейки $h = 0,02$ см.
2. Возможно, расчеты с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением *равно сжаиаемость* демонстрируют некорректность получаемых результатов на последовательно сгущаемых сетках.
3. Результаты расчетов с двухкомпонентной моделью и замыкающим соотношением *равенство давлений* на эйлеровой сетке практически не изменяются, начиная с $h = 0,002$ см, однако качественное описание экспериментальных данных может быть получено и при $h = 0,005$ см. То есть в расчетах с двухкомпонентной моделью сетка должна быть мельче как минимум в 2 раза, чем в расчетах с однокомпонентной моделью, и в 4–5 раз по сравнению с лагранжевой сеткой.

Заключение

Таким образом, для проведения расчетов с кинетикой МК на лагранжево-эйлеровой сетке в методике ЛЭГАК выработана методика, которая включает в себя следующее:

- 1) использование квадратичной неймановской вязкости с ориентированным характерным размером, $\mu = 4$;
- 2) использование ограничения счетного шага типа курантовского с зависимостью от скорости детонации ВВ, $\tau \leq k_D \frac{h}{D}$, с коэффициентом $k_D = 0,25$;
- 3) рекомендации при проведении расчетов с двухкомпонентной моделью среды:
 - а) использовать замыкающее соотношение в виде равенства давлений компонентов: $P_{ВВ} = P_{ПВ}$;

- б) при пересчете скоростей на эйлеровом этапе всегда использовать центрированные скорости [9];
- в) при пересчете величин в ячейке, в которой присутствуют вещества ВВ+ПВ, не использовать анализ вытекания веществ (полагается, что текут все вещества).

Для предложенной технологии проведения расчетов были подобраны параметры кинетики МК, реализованной в методике ЛЭГАК, как для однокомпонентной модели среды, так и для двухкомпонентной (таблица). Подробное описание модели кинетики МК и ее параметров представлено в работе [2].

Проведенный в настоящей работе анализ результатов моделирования процессов детонации с использованием кинетики МК по методике ЛЭГАК поможет выполнить аналогичные исследования и для других методик, внедряющих эту модель кинетики ВВ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 08-01-00807).

Константы кинетики МК для ВВ на основе ТАТБ для разработанной технологии проведения расчетов по методике ЛЭГАК

Параметр	Однокомпонентная среда	Двухкомпонентная среда
a	0,02	0,02
b	95	98
A_0	14	16
$A_1, \text{ГПа}^{-2}$	0,08	0,13
$A_2, \text{ГПа}^{-2}$	0,005	0,005
$A_3, \text{ГПа}^{-2}$	2	2
$P_a, \text{ГПа}$	19	19
$P_{кр}, \text{ГПа}$	1	1
W_c	0,77	0,77

Список литературы

1. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Ольхов В. О. и др. Расчетное моделирование с опорой на эксперименты инициирования и развития детонации ВВ на основе ТАТБ с учетом десенсибилизации при взаимодействии ударной и детонационной волн: Препринт 37–95. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1995.
2. Бахрах С. М., Володина Н. А., Зайцева М. О. и др. Экспериментальное и числен-

- ное исследование развития процесса детонации ВВ типа ТАТБ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 1. С. 41—56.
3. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А. Метод расчета течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых координатах // Докл. АН СССР. 1984. Вып. 4. С. 829—833.
 4. Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. и др. Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41—50.
 5. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Зайцева М. О., Тихонова А. П. Разностная схема расчета трехмерной лагранжевой газодинамики в комплексе ЛЭГАК-3D // Третья науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Сб. докл. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004. С. 77—82.
 6. Янилкин Ю. В., Шанин А. А., Ковалев Н. П. Комплекс программ ЭГАК для расчетов двумерных течений многокомпонентной среды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 4. С. 69—75.
 7. Код ЭГИДА-2D для моделирования двумерных задач: Уч. пособие. В 2 томах / Под ред. Ю. В. Янилкина. Саров: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 2008.
 8. Гончаров Е. А., Янилкин Ю. В. Новый метод расчета термодинамического состояния веществ в смешанных ячейках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 3. С. 16—30.
 9. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф. Схема согласованной аппроксимации конвективных потоков в методике ЛЭГАК // Там же. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1988. Вып. 4. С. 38—43.

Статья поступила в редакцию 06.11.09.
