

УДК 519.6

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИИ И ГОРЕНИЯ ВВ В ЭЙЛЕРОВЫХ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ РАСЧЕТАХ

Ю. В. Янилкин, И. И. Карпенко, Е. С. Гаврилова,
Л. И. Дегтяренко, Е. А. Маврина, О. О. Топорова
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Дается описание алгоритмов расчета взрывчатого превращения ВВ, реализованных в кодах ЭГАК и ТРЭК. Рассматриваются кинетики Тарвера и Морозова—Карпенко. Особое внимание уделено расчетам на дробной сетке.

Ключевые слова: ВВ (взрывчатое вещество), детонация, контроль скорости детонации, время инициирования, принцип Гюйгенса, адаптивно-встраиваемая дробная сетка, кинетика Тарвера, кинетика Морозова—Карпенко.

Введение

Известны два основных подхода для расчета процессов детонации и горения ВВ. Первый из них основан на использовании кинетики выгорания ВВ. Этот подход широко распространен, на его основе разработано несколько успешно применяемых моделей кинетики (см., например, [1–8]). С физической точки зрения этот подход наиболее полный и точный. Однако он требует больших ресурсов компьютера и не всегда может быть использован в расчетах реальных конструкций. Поэтому для случая идеальной детонации часто применяется второй подход, основанный на выделении фронта детонации и использовании математических методов навязывания скорости движения фронту волны из известных решений (см., например, [9, 10]).

В настоящей работе дано описание алгоритмов расчета детонации и горения ВВ, реализованных в кодах ЭГАК [11] и ТРЭК [12] для двумерных и трехмерных расчетов в эйлеровых переменных. Аналогичные вопросы применительно к коду ЛЭГАК-3D рассматриваются в работе [13]. Для численного моделирования процессов горения и детонации ВВ в коде ЭГАК реализовано несколько программ. Одни из них предназначены для моделирования лишь детонации, когда достаточно легко можно найти скорость ее распространения. Еще несколько программ

представляют собой реализации различных моделей кинетики разложения ВВ.

В настоящей работе рассматриваются кинетики Тарвера [1] и Морозова—Карпенко (МК) [4], при этом основное внимание уделено последней из них. Отметим, что модель МК первоначально была разработана и внедрена в методики с лагранжевыми сетками, адаптация ее к эйлеровым газодинамическим расчетам имеет ряд особенностей, которые рассматриваются в данной работе.

Для полноты изложения ниже приводятся и ранее опубликованные методы. Все указанные программы реализованы на адаптивно-встраиваемых дробных счетных сетках.

1. Основные положения

Прежде чем рассматривать конкретные алгоритмы, отметим несколько положений, применимых как для детонации, так и для горения ВВ.

1.1. Счетная сетка. В кодах ЭГАК и ТРЭК сетка может быть достаточно произвольной, однако четырехугольной в двумерном случае и шестигранной — в трехмерном. Основная сетка может дробиться в окрестности некоторой особенности течения и двигаться вместе с этой особенностью. Общие принципы и алгоритмы дробления сетки приведены в работе [14]. Здесь же от-

метим, что расчет детонации и горения производится на ячейках с определенным размером, который зависит от уровня дробления исходной сетки, задаваемого при подготовке расчета. Основных критериев дробления для данного класса задач несколько:

- в ВВ;
- в продуктах взрыва (ПВ);
- в смешанных ячейках, содержащих ВВ и ПВ;
- на фронте ударной (УВ) и (или) детонационной (ДВ) волн.

Известно, что сетка для моделирования процесса детонации и горения ВВ с применением кинетик должна быть достаточно мелкой, что затрудняет ее использование для проведения полномасштабных расчетов реальных конструкций из-за повышенных требований к ресурсам компьютеров. Использование дробной сетки в значительной степени ослабляет эти требования.

1.2. Представление ВВ и ПВ. ВВ и ПВ рассматриваются как разные вещества со своими объемными концентрациями, плотностями, удельными энергиями и уравнениями состояния (УРСами). Согласно этому положению при детонации и горении ВВ превращается в ПВ с выделением в нем энергии в соответствии с заданной калорийностью ВВ. Отметим, что в кодах ЭГАК и ТРЭК допускается наличие нескольких ВВ и соответственно столько же ПВ, что позволяет реализовать естественное обобщение модели для кинетики МК в представлении четырехкомпонентной модели смеси (см. подразд. 3.2). Используемая модель отличается от однокомпонентной модели (см., например, [4, 13, 15, 16]). По мнению авторов, это принципиальный момент при реализации как контроля детонации, так и кинетики в эйлеровых методиках. Однокомпонентная модель позволяет достичь вполне приемлемой точности в ряде задач, однако в некоторых случаях она может оказаться недостаточно точной в эйлеровых расчетах из-за наличия схемной вязкости (см. подразд. 3.2).

1.3. Условия замыкания в смешанных ячейках на лагранжевом этапе. В связи с тем, что детонация и горение происходят на фоне газодинамических течений, возникает проблема корректного счета параметров ВВ и ПВ в газодинамических программах за счет сжатия (растяжения) и конвективного переноса. В кодах ЭГАК и ТРЭК расчет газодинамики осу-

ществляется в два этапа: на первом этапе производится расчет газодинамических параметров в лагранжевых ячейках, на втором — расчет конвективных потоков при перестройке счетной сетки (при возврате ее в исходное состояние для чистоты эйлеровых расчетов).

На лагранжевом этапе возникает проблема корректного замыкания уравнений газодинамики в смешанных ячейках, содержащих ВВ и ПВ, а также нейтральные вещества. В кодах ЭГАК и ТРЭК существуют четыре стандартных типа замыкающих соотношений, в основу которых положены различные предположения о состоянии компонентов:

- 1) об одинаковой их сжимаемости [17];
- 2) о равенстве их давлений [18];
- 3) об одинаковом приращении давлений компонентов [19];
- 4) о равенстве массовых скоростей компонентов после прохождения малого возмущения [20].

В работе [15] применительно к кинетике Тарвера показано, что вполне корректно использование замыкающих соотношений с предположениями 2–4. В то же время неприемлемый по точности результат дает метод, основанный на приближении равенства дивергенций компонентов. В работе [15] были реализованы и два других условия замыкания: равенство давлений компонентов дополнено еще одним условием, а именно равенством плотностей (равноплотная модель) или условием адиабатичности ВВ (разноплотная модель). В расчетах получено, что равноплотная модель дает менее точные результаты по сравнению с разноплотной, которая по точности результатов близка к методам замыкания, основанным на предположениях 2–4.

1.4. Расчет потоков ВВ и ПВ из смешанных ячеек на эйлеровом этапе. На этапе адвекции для моделирования рассматриваемых процессов необходима коррекция метода концентраций, лежащего в основе кодов ЭГАК и ТРЭК. Этот метод базируется на локальном восстановлении положения контактных границ в окрестности смешанных ячеек по полю объемных концентраций веществ и вычислении потоков веществ из смешанных ячеек. Так как при горении ВВ, которое происходит в течение какого-то времени, нет четкой контактной границы между ВВ и ПВ, то попытки восстановления ее по стандартным алгоритмам метода кон-

центраций могут привести и приводят к некорректному счету потоков из смешанных ячеек. Поэтому при расчете потоков объемов компоненты ВВ и ПВ объявляются *компонентами смеси*. Тогда данное ВВ и соответствующее ему ПВ будут перетекать из ячейки в ячейку пропорционально их объемным концентрациям в донорной ячейке (при использовании донорного метода) или же определяться исходя из параболического распределения (при использовании кусочно-параболического метода — РРМ). При расчете потоков массы и энергии ВВ и ПВ найденные потоки объемов заполняются в соответствии с индивидуальным термодинамическим состоянием этих веществ, как для обычных компонентов. Оба указанных случая реализованы в кодах ЭГАК и ТРЭК [21].

1.5. Искусственная вязкость. Для методик, использующих алгоритмы *сквозного счета* УВ (к которым принадлежат методики ЭГАК и ТРЭК) с применением искусственной счетной вязкости, при реализации кинетики МК возникает проблема определения фронта УВ, размазанного на несколько ячеек, и скачка давления на нем, который вносит свою лепту в трудности реализации этой модели.

Как показано в работе авторов [22], для двумерных (тем более трехмерных) течений важное значение имеет форма искусственной вязкости. В [22] показано, что стандартно используемая квадратичная вязкость типа Неймана—Рихтмайера со скалярным размером счетной ячейки может приводить к значительным погрешностям на неоднородных по фронту УВ сетках. А это ведет к тому, что термодинамическое состояние среды вдоль УВ будет разным в разных ячейках, что особенно сказывается при использовании различных кинетик. В кодах ЭГАК и ТРЭК при моделировании любых УВ-течений применяется ориентированная в направлении УВ вязкость, свободная от указанной погрешности. Новая форма такой вязкости предложена в [22], и именно она использовалась в расчетах, рассмотренных ниже.

2. Моделирование детонации

Для расчетов процесса детонации ВВ реализованы две так называемые программы контроля скорости ДВ, основанные на двух разных методах, и программа, реализующая кинетику Аррениуса.

Для программ контроля скорости ДВ при расчете детонации необходимо первоначальное инициирование, т. е. должны задаваться времена инициирования на линии, поверхности или в точках инициирования. При этом безразлично, совпадает линия инициирования с линиями сетки или нет. Для задания инициирования (т. е. времен и координат точек инициирования) разработана специальная программа, в которой рассчитываются истинные времена инициирования в узлах, ближайших к заданным линиям, поверхностям и точкам инициирования, и заносятся координаты центров инициирования.

2.1. Метод 1, основанный на хранении времен прихода ДВ в узлы сетки.

2.1.1. Основные положения метода. Один из первых алгоритмов аналитического определения положения фронта для двумерного случая был опубликован в работе [9]. Основная суть метода заключается в том, что, зная линию или точки инициирования в начальный момент времени и скорость детонации, можно определить точное положение фронта ДВ во все последующие моменты времени, используя принцип Гюйгенса.

Метод, реализованный в кодах ЭГАК и ТРЭК, кратко описан в работе [23]. В этом методе на каждом счетном шаге для нахождения положения фронта ДВ используется подход, в котором не определяются координаты фронта, а рассчитываются времена прихода ДВ в узлы счетной сетки по значениям с предыдущего шага по времени, что позволяет восстановить координаты точек фронта в ячейках.

Основные положения, использованные при реализации этого метода (кроме изложенных в разд. 1), следующие:

1. Постулируется, что детонация происходит в соответствии с принципом Гюйгенса, который предполагает, что ДВ распространяется в пространстве (в двумерном случае на плоскости) таким образом, что каждая точка волнового фронта на момент времени t^{n+1} является центром вторичной элементарной сферической волны (в двумерном случае — окружности), а фронт ДВ является огибающей множества элементарных волн.
2. На каждом шаге по времени в каждом узле сетки определяются (если они еще не определены) и затем хранятся времена прихода ДВ.

3. Выделение энергии производится в соответствии с положением фронта ДВ в ячейке, определяемого сферами, построенными из ближайших центров детонации (в общем случае они не совпадают с ближайшими узлами сетки). Радиусы сфер (окружностей в двумерном случае) определяются локальной скоростью детонации, временами прихода волны в узлы — вершины данной ячейки и текущим временем.
4. Локальная скорость ДВ предполагается зависящей от ее пространственного расположения и от термодинамического состояния ВВ в рассматриваемой ячейке (в частном случае она является константой).

2.1.2. *Определение времен прихода ДВ в узлы сетки.* Рассмотрим метод на примере трехмерного случая (двумерный является частным случаем и легко получается из трехмерного). Трехмерная ячейка представляет собой шестигранник с восемью вершинами — узлами счетной сетки.

Времена t_D прихода ДВ в узлы сетки вычисляются только в тех ячейках с ВВ, вершинами которых являются от 1 до 7 узлов сетки, удовлетворяющих условию $t^n < t_D < t^{n+1}$. Для каждого возможного случая (в зависимости от количества уже сдетонировавших узлов) реализован соответствующий алгоритм:

1. Имеется один сдетонировавший узел. Согласно принципу Гюйгенса этот узел сам является центром сферической волны (узел 1 на рис. 1). Фронт волны в этом случае определяется сферой с центром в данной точке и радиусом, на момент t^{n+1} равным $R_D = (t^n - t_D^1 + \tau)W$, где W — скорость детонации; t^n — текущее время; t_D^1 — время детонирования данного узла; τ — временной шаг. Тогда времена прихода ДВ в остальные уз-

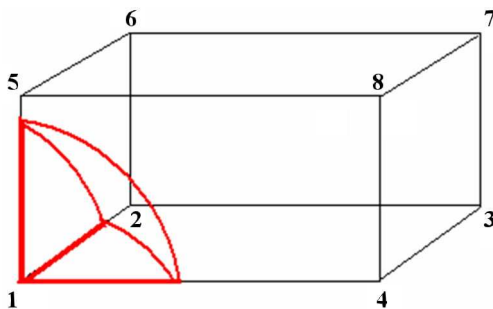


Рис. 1. Случай одного узла инициирования

2. Известны времена детонирования двух смежных узлов. В данном случае каждый из этих двух узлов является центром инициирования ДВ. В оставшихся шести узлах — вершинах ячейки вычисляются времена прихода ДВ из известных двух узлов и берется меньшее из этих времен.
3. Известны времена детонирования трех узлов. В данном случае необходимо определение центра инициирования ДВ по известным трем узлам посредством нахождения точки пересечения трех сфер с радиусами $R_\xi = t_D^\xi W$. Найденная точка и будет центром инициирования ДВ, приходящей в остальные узлы. Если не удастся найти единого центра, то считается, что имеется два центра в двух смежных узлах сетки (см. п. 2).
4. Известны времена детонирования четырех узлов. Если эти узлы находятся на одной грани ячейки и времена прихода в них ДВ одинаковы, то имеет место плоская ДВ и в остальных узлах времена прихода ДВ рассчитываются, как для плоской волны. Если волна не плоская, то в этом случае сначала определяется центр инициирования ДВ по трем уже сдетонировавшим узлам (для нахождения центра инициирования берутся три узла из четырех с наименьшими временами прихода ДВ). Затем рассматриваются два возможных варианта для каждого из узлов, в которых необходимо определить время прихода ДВ: узел находится в зоне прямой видимости или вне ее.

В качестве примера рассмотрим рис. 2 (для большей наглядности взят двумерный

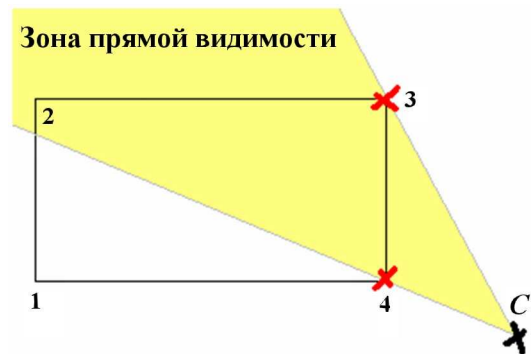


Рис. 2. Иллюстрация зоны прямой видимости

случай), где узел 2 находится в зоне прямой видимости, а узел 1 — вне зоны.

Для узла 2, находящегося в зоне прямой видимости, время прихода ДВ находится следующим образом: из точки C (центр инициирования) проводится окружность через узел 3 или 4 и ищется кратчайшее расстояние от узла 2 до полученной окружности (в трехмерном случае вместо окружности будет сфера). Формула для определения времени прихода ДВ в узел 2 имеет вид $t_D^2 = t_D^j + l^2/W$, где t_D^2 — искомое время прихода ДВ в узел 2; t_D^j — известное время прихода ДВ в узел 3 или 4 (в зависимости от того, какой узел используется); l^2 — расстояние от узла 2 до окружности, проведенной из точки C через узел j .

Для узла 1 вне зоны прямой видимости ДВ сначала идет от центра инициирования C до узла 4, а уже дальше — до узла 1. Формула для определения времени прихода ДВ в узел 1 имеет вид $t_D^1 = t_D^j + l^{14}/W$, где l^{14} — расстояние между узлами 1 и 4.

5. Остальные три случая, с числом сдетонировавших узлов 5, 6 и 7, аналогичны предыдущему случаю и сводятся к нахождению центра инициирования ДВ и неизвестных времен ее прихода в узлы по разным алгоритмам, в зависимости от того, находится тот или иной узел в зоне прямой видимости или вне ее.

2.1.3. Пересчет термодинамического состояния в ячейках. После определения времен прихода ДВ в узлы сетки, являющиеся вершинами рассматриваемой ячейки, новое термодинамическое состояние в ней определяется объемами частей, образовавшихся в результате ее пересечения фронтом ДВ и выделением в одной из этих частей энергии в соответствии с calorificностью ВВ. Объемы ВВ и ПВ определяются с помощью пересечения сферических фронтов детонации (окружностей в двумерном случае) с ребрами ячейки. Определение координат точек фронта на ребрах ячейки производится линейной интерполяцией времен прихода ДВ в узлы, расположенные на рассматриваемом ребре.

После определения указанных точек пересечения на ребрах ячеек определяется объем сдетонировавшего за данный счетный шаг ВВ. Объемы ВВ и ПВ для двумерного случая определяются соответственно как площади четырехугольников 1 и 2, изображенных на рис. 3. В трехмер-

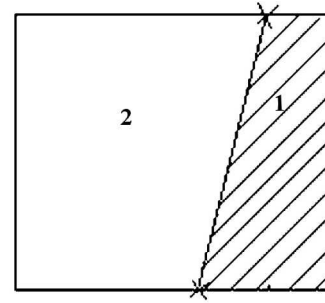


Рис. 3. Иллюстрация к вычислению объема выгоревшего ВВ

ном случае каждый из этих объемов определяется как объем некой пространственной фигуры, образованной линейчатой поверхностью, натянутой на найденные точки пересечения на ребрах ячейки, и гранями ячейки.

Примечание. Аппроксимация фронта внутри двумерной ячейки отрезком прямой не совпадает с точным положением фронта ДВ, однако это не сказывается на скорости распространения фронта ДВ в целом по ВВ.

В соответствии с найденными объемами рассчитывается новое термодинамическое состояние в ячейке. Объемные концентрации пересчитываются по формуле

$$\tilde{\beta}_\xi = \frac{\tilde{V}_\xi}{V},$$

где V — объем вещества; $\xi = 1, 2$ — номера веществ ВВ и ПВ; "тильда" означает принадлежность новому временному слою.

Плотность и энергия ВВ на этом этапе не меняются, т. е. $\tilde{\rho}_1 = \rho_1$; $\tilde{e}_1 = e_1$.

Плотность и энергия ПВ пересчитываются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_2 &= \frac{\rho_2 V_2 + (\tilde{V}_2 - V_2) \rho_1}{\tilde{V}_2}; \\ \tilde{e}_2 &= \frac{e_2 \alpha_2 + (e_1 + Q) (\alpha_1 - \tilde{\alpha}_1)}{\tilde{\alpha}_2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $V_2 = \beta_2 V$; $\alpha_\xi = \beta_\xi \rho_\xi / \rho$ — массовые концентрации ВВ ($\xi = 1$) и ПВ ($\xi = 2$); Q — calorificность.

Формулы (1) справедливы в случае нахождения в ячейке только двух веществ — ВВ и ПВ. Однако в эйлеровых расчетах могут быть смешанные ячейки, содержащие дополнительно один и более нейтральных компонентов, и алгоритм расчета должен это учитывать. С этой

целью отнормируем объемные концентрации ВВ и ПВ:

$$\widehat{\beta}_\xi = \frac{\beta_\xi}{\beta_1 + \beta_2} \quad (2)$$

(ξ — номера веществ ВВ и ПВ). Подобная нормировка означает, что ячейка заполнена только компонентами ВВ и ПВ. Теперь в формулах (1) и (2) используем новые значения объемных концентраций. После определения по формулам (1), (2) новых значений плотности и энергии новые значения β_ξ должны быть снова перенормированы: $\overline{\beta}_\xi = \widehat{\beta}_\xi (\beta_1 + \beta_2)$.

Отметим, что в описанном алгоритме не требуется постоянства скорости детонации, в общем случае она может зависеть от локального термодинамического состояния ВВ. Эти зависимости могут быть самыми разными, поэтому разработана система, позволяющая легко вводить новые возможности.

2.2. Метод 2, основанный на хранении координат центров инициирования. Предыдущий метод дает вполне корректный результат во многих случаях, однако выяснилось, что при достаточно сложных конфигурациях системы положение фронта ДВ определяется по этому методу недостаточно точно, в частности, когда ВВ претерпевает какие-то пространственные движения еще до начала детонации. Поэтому был разработан другой метод, основным отличием которого от первого является то, что в нем для узлов сетки определяются и затем хранятся не только времена прихода ДВ, но и координаты центров их инициирования.

Рассмотрим действие этого алгоритма на примере двумерной ячейки, у которой среди вершин имеются два сдетонировавших узла сетки с известными временами детонирования. Для этих же узлов определены и центры инициирования приходящих в них ДВ. Необходимо найти времена детонирования других узлов — вершин данной ячейки и определить центры инициирования приходящих в них ДВ.

Возможны два случая.

Первый: центры инициирования ДВ для обоих уже сдетонировавших узлов разные. Тогда считаем, что через каждый сдетонировавший узел идет своя ДВ и после ее прохождения этот узел становится центром инициирования ДВ, идущей дальше до других узлов. Таким образом, в каждый узел — вершину рассматриваемой ячейки — для которого требуется определить время детонирования, приходят две ДВ

с известными временами инициирования в уже сдетонировавших узлах. После вычисления времен их прихода в данный узел берется меньшее из этих времен.

Во втором случае центр инициирования один и тот же, и поступаем так же, как в алгоритме для метода 1 (см. подразд. 2.1.2).

Во всем остальном метод 2 не отличается от метода 1.

2.3. Кинетика Аррениуса. Данная кинетика основана на мгновенном энерговыделении на фронте ДВ и используется для повышения точности двух вышеописанных методов.

Стандартным подходом при расчетах процессов распространения ДВ является одновременное использование программы контроля скорости детонации с кинетикой Аррениуса.

3. Кинетики выгорания ВВ

3.1. Кинетика Тарвера. Данная кинетика в кодах ЭГАК и ТРЭК реализована с использованием стандартного двухкомпонентного подхода, описанного выше и в [14]. При этом в качестве замыкающего условия в смешанных ячейках с ВВ и ПВ можно использовать как стандартные замыкающие соотношения, так и специальные, введенные для смеси ВВ+ПВ. Авторы отдают предпочтение модели, основанной на стандартных для указанных методик методах замыкания, в силу ее общности и пригодности также для нейтральных веществ.

3.2. Кинетика МК. Кинетика МК для реагирующей смеси первоначально сформулирована для лагранжевой частицы в однокомпонентном приближении [4, 16]. В этом случае смесь ВВ+ПВ по сути является одним веществом, которое характеризуется степенью выгорания W . При программной реализации модели необходимо хранить еще две дополнительные величины: признак фронта УВ и выгорание ВВ на фронте инициирующей УВ. Если расчет ведется на лагранжевой сетке, то этих данных достаточно. Однако при использовании эйлеровой сетки возникают проблемы, связанные с решением уравнения адвекции, т. е. с перетеканием смеси из одной ячейки в другую. В работе [13] в этом случае на эйлеровом этапе производится пересчет указанных выше величин кинетики.

Авторы данной статьи разработали многокомпонентную модель смеси для кинетики МК,

кратко описанную в [24], которая представляется им более естественной для использования на эйлеровых сетках. В этой модели предлагается разделить две различные стадии ВВ (и соответственно две стадии ПВ) со своими УРСами. Первая стадия — это $ВВ_1$ и $ПВ_1$, находящиеся в состоянии до прохождения УВ; вторая стадия — это $ВВ_2$ и $ПВ_2$ в состоянии после прохождения УВ. Таким образом, в этой математической модели имеется четыре компонента: два ВВ и два соответствующих им ПВ.

Переход ВВ из первой стадии во вторую происходит для каждой счетной ячейки индивидуально, при одновременном выполнении условий $P > P_{кр}$ и $q/(P + q) > \delta$, где P — давление; $P_{кр} \sim 1$ ГПа — некоторое критическое давление, коррелирующее с его значением на фронте УВ; q — искусственная вязкость; $\delta \sim 0,01$. Сама процедура перехода означает изменение номера вещества $ВВ_1$ на номер $ВВ_2$, а также пересчет плотностей и энергий для $ВВ_2$ с сохранением массы и внутренней энергии. Состояние $ПВ_1$ остается без изменений; если в ячейке дополнительно имеются нейтральные компоненты, то их термодинамическое состояние также оставляется без изменений. Дополнительно в этой модели хранится величина выгорания ВВ на фронте инициирующей УВ, которая при решении уравнения адвекции интерполируется на единицу массы ПВ.

На рис. 4 приводится графическая иллюстрация перехода веществ из первой стадии во вторую.

Замечание. В этой модели $ПВ_1$ и $ПВ_2$ могли бы быть объединены в одно вещество при условии, что у них один и тот же УРС, тогда модель была бы трехкомпонентной. Наличие избыточного вещества объясняется необходимостью хра-

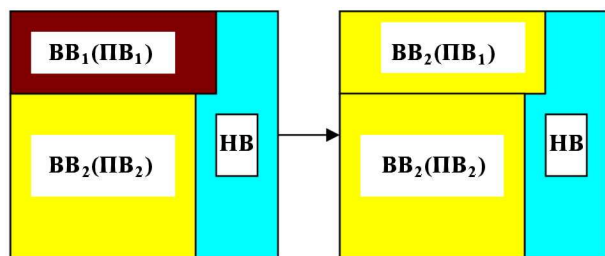


Рис. 4. Графическая иллюстрация перехода ВВ и ПВ из одного состояния в другое: слева — состояние до перехода, справа — после перехода; НВ — нейтральное вещество

нения каждой пары ВВ+ПВ в силу соответствующей организации кода.

4. Тестовые расчеты детонации

4.1. Обтекание двух углов. Начальная геометрия системы представлена на рис. 5 ($t = 0$). Геометрия плоская, скорость детонации равна 8. Иницирование происходит на границе a_1a_2 одновременно. Счетная сетка — квадратная, для ВВ и ДВ задавалась сетка первого уровня дробления. В задаче считается только процесс энерговыделения в ДВ без газодинамического движения. Расчет проводился с использованием метода 2 расчета ДВ.

На рис. 5 указаны точки (для $t = 0$), в которых происходит изменение центров иницирования в процессе распространения ДВ: a_3, a_5, a_6 . Представлены фрагменты счетной области, содержащие фронт ДВ в разные моменты времени.

4.2. Расчет детонации с использованием контроля скорости детонации совместно с кинетикой Аррениуса. В работе [10] теоретически и численно показано, что использование только программы контроля скорости детонации с мгновенным выделением энергии за фронтом ДВ в лагранжевых расчетах может приводить к заметной погрешности решения, особенно на подробных сетках. Поэтому в кодах ЭГАК и ТРЭК стандартным подходом при расчетах *нормальной* детонации является одновременное использование программы контроля скорости детонации и кинетики Аррениуса. В этом случае в начальные моменты иницирования ведущая роль отводится программе контроля, а затем, после выхода на самоподдерживающийся режим, начинает "вести процесс" кинетика Аррениуса. На этом этапе программа контроля срабатывает только в случае, если ячейка, которая должна была выгореть теоретически, все еще не выгорела.

На рис. 6 представлены в сравнении с точным решением результаты двух расчетов задачи о распространении нормальной ДВ по ВВ — с использованием только программы контроля скорости детонации и с использованием программы контроля одновременно с кинетикой Аррениуса.

В данных расчетах брались следующие параметры ВВ и ПВ: УРС — для идеального газа с $\gamma = 3$ (для ВВ и ПВ); $\rho_0 = 1,85$ г/см³; $D = 8,86$ км/с; $Q = 4,906$ кДж/г. Счетная сетка — 10 точек на 1 мм.

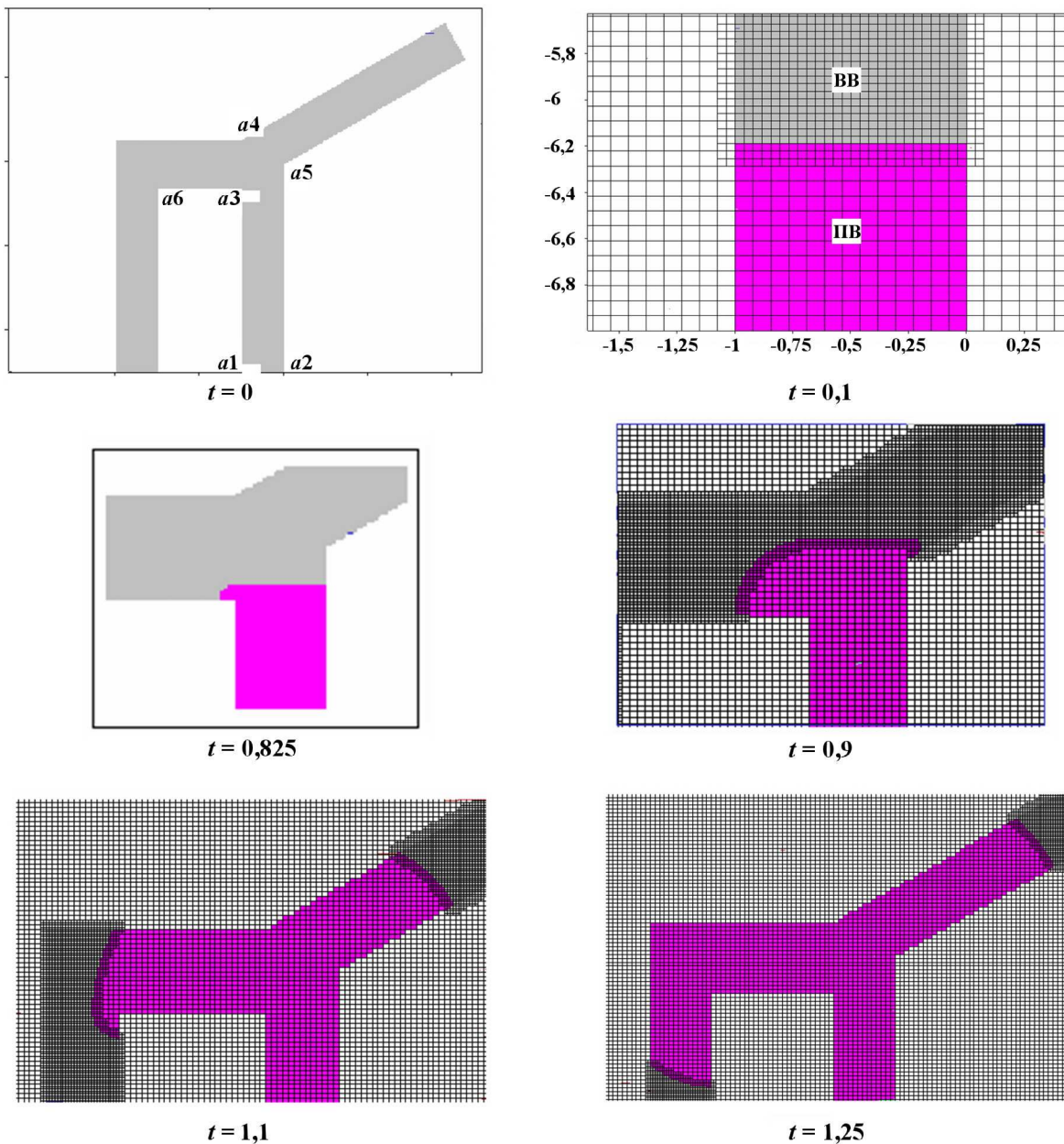


Рис. 5. Геометрия системы в разные моменты времени

Сравнение результатов показывает, что при расчете с использованием контроля скорости детонации в комбинации с кинетикой Аррениуса они ближе к точному решению, чем при расчете с контролем скорости детонации без использования кинетики Аррениуса.

5. Тестовые расчеты по кинетике МК

5.1. Возбуждение детонации в ВВ. Постановка расчетов соответствует экспериментам [16]. Начальная геометрия системы пред-

ставлена на рис. 7. Геометрия состоит из двух ВВ: основного ВВ₁ (размером 2,5 см × 5 см) и вспомогательной шашки — ВВ₂. В начальный момент времени шашка инициируется в точке, указанной на рисунке стрелкой.

Детонационные процессы в шашке рассчитывались с использованием программы контроля скорости детонации, в ВВ₁ — по кинетике МК с константами $P_{кр} = 1$; $P_0 = 0$; $A = 19$; $b = 95$; $P_a = 19$; $a = 0,02$; $W_c = 0,77$; $\varepsilon = 0,001$; $A_1 = -0,08$; $A_2 = -0,005$; $A_3 = -2$. Данный набор констант полностью совпадает с принятым

Таблица 1

Параметры системы

Номер расчета (опыта)	$\rho_0, \text{г/см}^3$	$a, \text{см}$	$H, \text{см}$
1	1,92	1,54	1,01
2	1,91	1,03	0,98
3	1,91	0,6	1,05
4	1,91	0,41	1,06

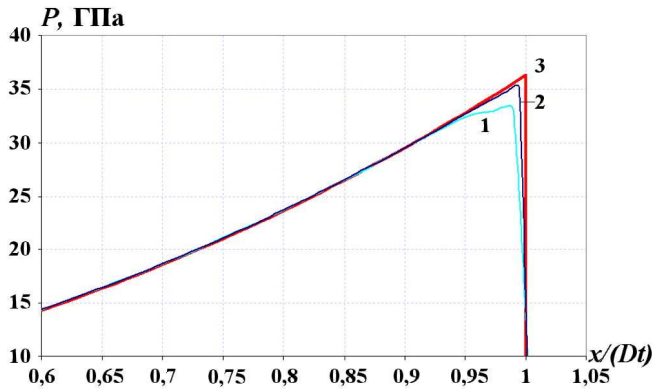


Рис. 6. Зависимость давления от безразмерной координаты $x/(Dt)$: 1 — программа контроля; 2 — программа контроля + кинетика Аррениуса; 3 — точное решение

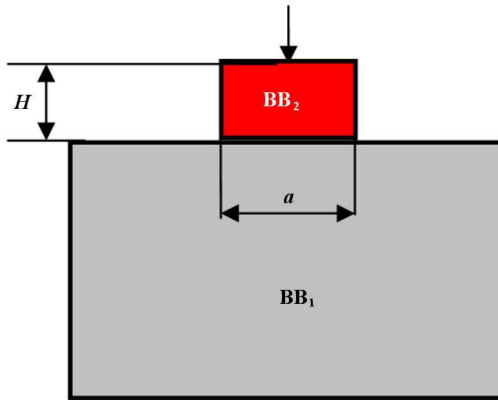


Рис. 7. Начальная геометрия системы

ранее в методике ДМК [4]. Для BB_2 использовался УРС Ми–Грюнайзена с константами $\rho_0 = 1,86 \text{ г/см}^3$, $c_0 = 2,53 \text{ км/с}$, $n = 6,65$, $\gamma = 1,95$; для BB_1 — УРС из [25]: $A = 3,945$, $F = 80,045$, $E_n = 0,6$, $\xi = 4,0393$, $\rho_0 = 1,86 \text{ г/см}^3$, $G_0 = 0,6$, $D = 8,79$, $Q = 6,144$. Для BB_1 использовался УРС Ми–Грюнайзена с константами $\rho_0 = 1,91 \text{ г/см}^3$, $c_0 = 2,43 \text{ км/с}$, $n = 6,2$, $\gamma = 3,1$; а для BB_2 — УРС из [25]: $A = 2,21457$, $F = 75,8$, $E_n = 0,6$, $\xi = 4,38302$, $\rho_0 = 1,91 \text{ г/см}^3$, $G_0 = 0,5$, $D = 7,62$, $Q = 3,65$.

Расчеты проводились на сетке с $h = 0,02$ с использованием дробной сетки второго уровня. Признак дробления состоял из трех критериев: 1) в смешанной ячейке; 2) по УВ; 3) по ДВ. В расчетах варьировались начальные плотности BB на основе ТАТБ и размеры a и H (см. рис. 7 и табл. 1).

На рис. 8 (см. также цветную вкладку) представлены растровые картины средней плотности

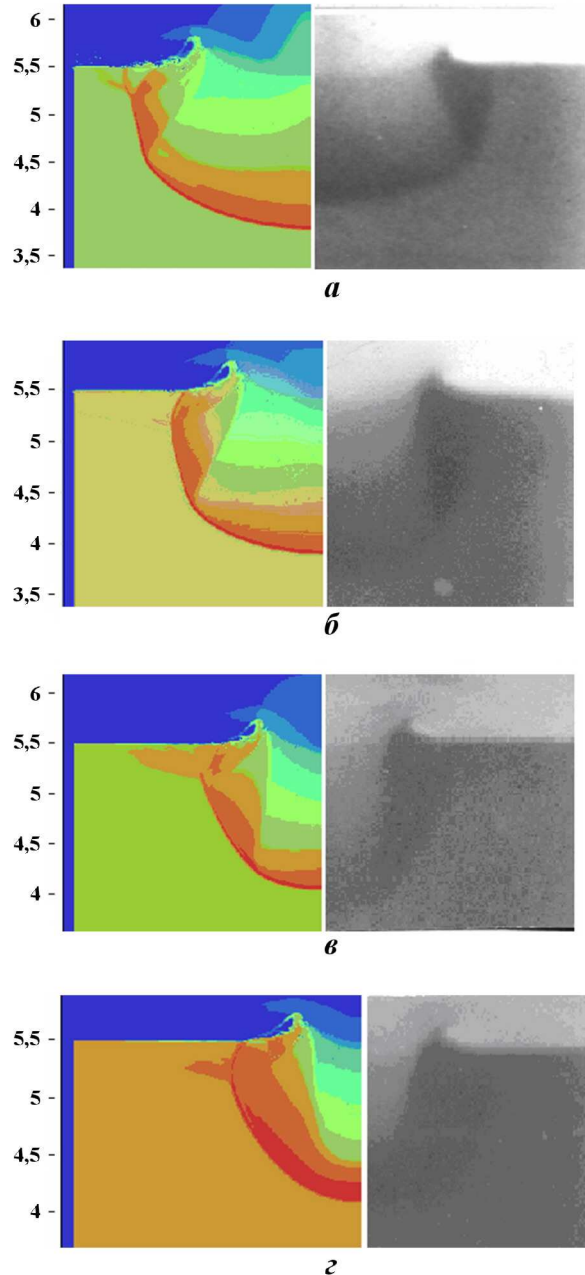


Рис. 8. Растровые картины плотности (слева) и рентгенографические снимки (справа): а — расчет (опыт) 1; б — расчет (опыт) 2; в — расчет (опыт) 3; г — расчет (опыт) 4

из расчетов 1–4 в сравнении с рентгенографическими снимками. Из рисунков видно, что чем меньше размер инициирующей шашки, тем больше зона невыгоревшего ВВ₁. При размере шашки $a = 0,41$ см детонация затухает на глубине $\sim 0,6$ см от поверхности, что соответствует эксперименту.

5.2. Распространение детонации в канале из ВВ. Начальная геометрия представляет собой цилиндрический канал радиусом 0,06 см, заполненный ВВ на основе тэна типа ХТХ-8003. Канал окружен пенопластом. В начальный момент времени левый торец ВВ инициируется.

Для ВВ использовался УРС типа Ми–Грюнайзена с константами $\rho_0 = 1,53$ г/см³, $c_0 = 2,45$ км/с, $n = 6,4$, $\gamma = 1,55$; для ПВ – УРС [23] с константами $A = 4,4825$, $F = 85,4065$, $E_n = 0,6$, $\xi = 4,8286$, $\rho_0 = 1,53$ г/см³, $G_0 = 0,4$, $D = 7,82$, $Q = 5,7$. Для пенопласта использовался УРС Ми–Грюнайзена с константами $\rho_0 = 0,68$ г/см³, $c_0 = 2,5$ км/с, $n = 5$, $\gamma = 5,2$. Кинетика МК применялась с константами $P_{кр} = 0,45$, $P_0 = 0$, $A = 32$, $b = 80$, $P_a = 4$, $a = 0,02$, $W_c = 0,85$, $\varepsilon = 0,001$, $A_1 = -2,8$, $A_2 = -0,005$, $A_3 = -2$.

Расчеты проводились на сетке с размером ячейки $h = 0,01$, а также на дробных сетках первого и второго уровней по ДВ, УВ и в окрестности смешанных ячеек.

В табл. 2 приведены сравнительные результаты расчетов по параметрам детонации в канале при применении дробных сеток.

Видно сильное влияние сетки на расчетные параметры детонации, при измельчении сетки имеет место сходимостъ результатов. При этом в расчетах со вторым уровнем дробления (т. е. при $h_{\min} = 0,0025$ см) детонационные параметры в канале близки к экспериментальным [26].

Таблица 2

Сравнение результатов расчетов

Величина	Основная сетка, $h = 0,01$ см	Дробная сетка		Эксперимент [26]
		первого уровня	второго уровня	
P_{\max} (в химпике), ГПа	11,3	24,8	28,1	–
Скорость детонации в канале, км/с	5,4	7,1	7,6	7,4–7,7

На рис. 9 (см. также цветную вкладку) приводится растровая картина средней плотности веществ для расчета на дробной сетке второго уровня, на рис. 10 (см. также цветную вкладку) показан фрагмент счетной сетки.

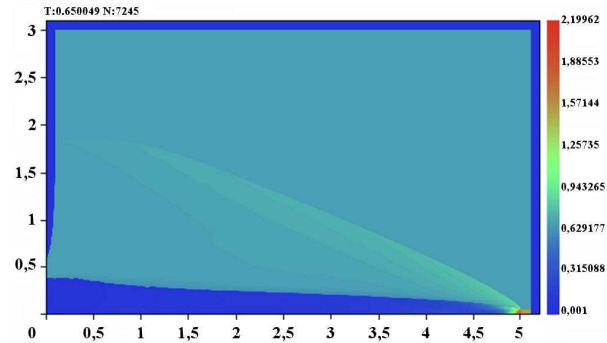


Рис. 9. Растровая картина плотности веществ в расчете с $h = 0,01$ с дробной сеткой второго уровня, $t = 0,65$

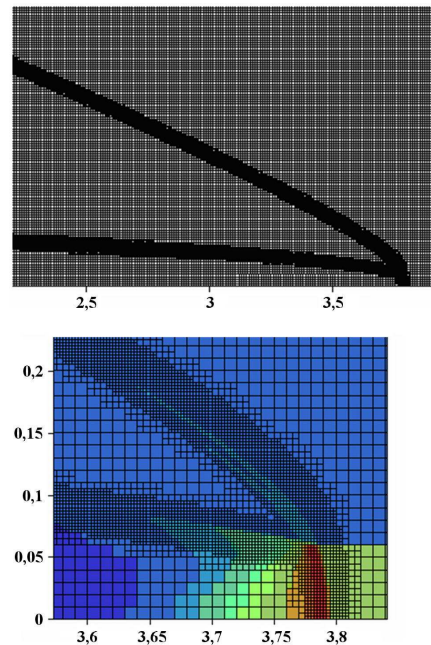


Рис. 10. Фрагмент счетной сетки из расчета с дробной сеткой второго уровня; внизу — часть фрагмента в увеличенном масштабе

5.3. Развитие детонации с учетом десенсибилизации ВВ. Постановка задачи взята из работы [13]. Начальная геометрия задачи представлена на рис. 11. Система состоит из основного ВВ₁ типа ТАТБ (вещество 1) и инициирующих шашек размером 15 мм × 10 мм (вещества 2 и 3); $L1 = L2 = 25$ мм. Инициирование шашек

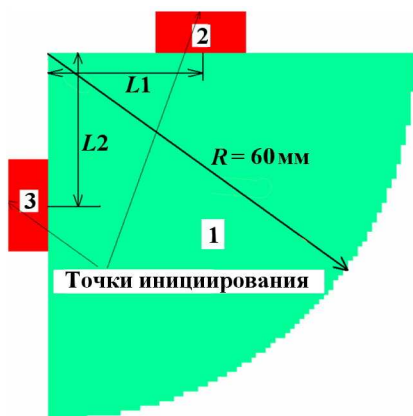


Рис. 11. Начальная геометрия задачи

задавалось с задержкой в 4,9 мкс. Детонация в шашках рассчитывалась с использованием программы контроля скорости детонации, в ВВ₁ — по кинетике МК.

Расчеты проводились в газодинамическом приближении на прямоугольной адаптивно-встраиваемой дробной сетке третьего уровня. Признак дробления состоял из двух критериев: 1) ячейка является смешанной; 2) в смешанной ячейке присутствуют концентрации ВВ₁ и ПВ₁. Сетка основного уровня строилась таким образом, чтобы после ее трехкратного дробления по-

лучалось ~ 10 ячеек на 1 мм. Параметры кинетики МК и параметры УРСа для ВВ₁ описаны в подразд. 5.2.

На рис. 12 (см. также цветную вкладку) в качестве результатов расчетов приведены растровые картины объемных концентраций веществ и средней плотности в сравнении с экспериментом и расчетом по методике ЛЭГАК [15] на момент времени $t = 9$ мкс. Эти рисунки демонстрируют приемлемое согласие. В расчетах по обеим методикам и в эксперименте наблюдается эффект затухания ДВ при попадании в область ВВ, предварительно сжатого УВ. Расчетная зона десенсибилизированного ВВ хорошо согласуется с экспериментом.

Рассмотрим вопрос о счетной сетке. Если наложить на данную геометрию сетку с размером ячейки $\sim 0,1$ мм (необходимый размер для расчета по кинетике МК данной задачи в рамках методики ЭГАК), получится сетка, состоящая приблизительно из 560 тыс. ячеек. При использовании дробной сетки с заданными критериями дробления количество ячеек значительно уменьшается: в 64 раза для начальной геометрии и в 3 раза на заключительной стадии расчета, когда дробная сетка занимает примерно 1/3 часть всей геометрии (рис. 13) и общее количество ячеек сетки составляет ~ 200 тыс. Таким образом,

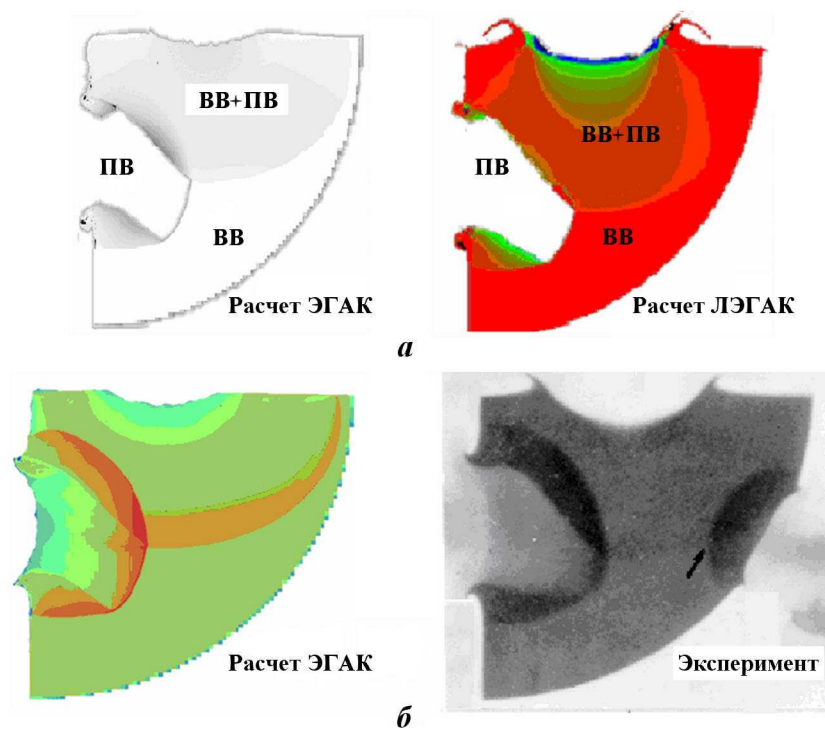


Рис. 12. Растровые картины: а — объемные концентрации ВВ₁; б — средняя плотность

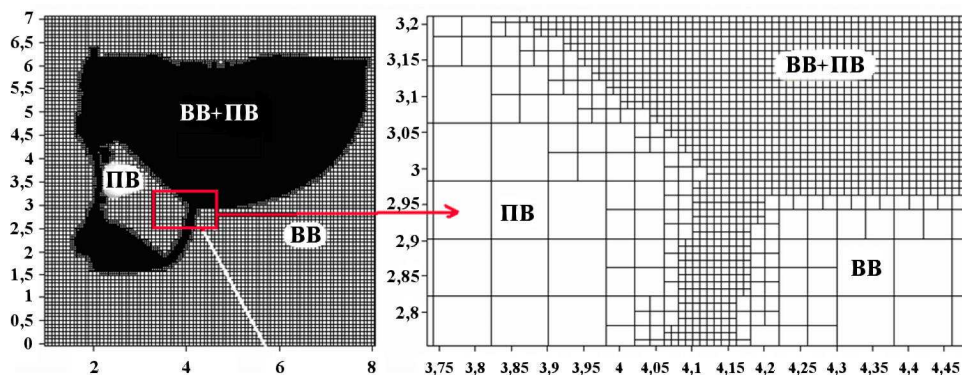


Рис. 13. Счетная сетка на заключительный момент времени

использование дробной сетки дает значительную экономию как памяти для хранения данных, так и времени счета даже с учетом удорожания расчета одной точки при использовании дробления (примерно на 20%). Конечно, при этом возникают значительные трудности при распараллеливании алгоритмов (касающиеся не только рассматриваемых процессов), однако эти вопросы выходят за рамки данной работы и здесь не рассматриваются.

Заключение

Описаны методы моделирования детонации и горения ВВ, реализованные в кодах ЭГАК и ТРЭК для расчета этих процессов на неподвижных счетных сетках. Представлены результаты расчетов двумерных и трехмерных задач на неподвижных сетках с использованием программ контроля скорости детонации и четырехкомпонентной модели кинетики МК. Расчеты проводились с применением адаптивно-встраиваемой дробной сетки. Анализ результатов расчетов продемонстрировал хорошее согласие с существующими экспериментальными данными, что показывает приемлемость принятой математической модели и технологии проведения подобных расчетов.

Список литературы

1. *Tarver M. C., Lee L. E.* Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives // *Phys. Fluids*. 1980. Vol. 23(12). P. 2362.
2. *Мейдер Ч.* Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
3. *Копышев В. П., Прошин М. М.* Численное моделирование развития детонации в разных предположениях о кинетике разложения ВВ // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика*. 1991. Вып. 3. С. 27–33.
4. *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. С. 32–41.
5. *Аминов Ю. А., Вершинин А. В., Еськов Н. С. и др.* Модифицированная модель макрокинетики детонации ВВ на основе ТАТБ // *ФГВ*. 1997. Т. 33, № 1. С. 94.
6. *Клименко В. Ю.* Многопроцессная модель кинетики // *Химическая физика*. 1998. Т. 17, № 1. С. 11–15.
7. *Гребенкин К. Ф., Жеребцов А. Л., Тараник М. В. и др.* Физическая модель ударно-волнового инициирования детонации пластифицированного ТАТБ // *Там же*. 2006. Т. 42, № 5. С. 117–126.
8. *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.
9. *Бахрах С. М., Краснов Б. Н., Цыкин С. В., Шавердов С. А.* Расчетное исследование перехода горения тэна во взрыв в рамках модели с выделенным фронтом горения // *ФГВ*. 1996. Т. 32, № 6. С. 96–107.

10. Бондаренко Ю. А. Свойства решений при счете нормальной детонации навязыванием энерговыделения с заданной скоростью фронта // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 1. С. 3–18.
11. Янилкин Ю. В., Шанин А. А., Ковалёв Н. П. и др. Комплекс программ ЭГАК для расчетов двумерных течений многокомпонентной среды // Там же. 1993. Вып. 4. С. 69–75.
12. Yanilkin Yu. V., Tarasov V. I., Stadnik A. L. et al. Program system TREK for numerical simulation of 3D multi-component medium flows // Proc. of Workshop "New Models and Numerical Codes for Shock Wave Processes in Condensed Media". Oxford, 1997. P. 413–422.
13. Володина Н. А., Мышкина И. Ю., Спиридонов В. Ф. Исследование влияния счетных параметров при численном моделировании процесса взрывчатого превращения ВВ по кинетике МК в методике ЛЭГАК // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 2. С. 3–14.
14. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Городничев А. В. и др. Комплекс программ ЭГАК++ для моделирования на адаптивно-встраиваемой дробной счетной сетке // Там же. 2003. Вып. 1. С. 20–28.
15. Горбенко А. Д., Кузьмицкий И. В., Софронов В. Н., Янилкин Ю. В. Равноплотная и разноплотная модели смеси ВВ и ПВ при расчетах процессов горения по кинетике Тарвера // IX Харитоновские чтения "Экстремальные состояния вещества, детонация, ударные волны". Саров, 2007. С. 68–75.
16. Бахрах С. М., Володина Н. А., Зайцева М. О. и др. Экспериментальное и численное исследование развития процесса детонации ВВ типа ТАТБ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 1. С. 41–56.
17. Бахрах С. М., Спиридонов В. Ф., Шанин А. А. Метод расчета двумерных осесимметричных газодинамических течений неоднородной среды в лагранжево-эйлеровых переменных // Докл. АН СССР. 1984. Т. 274, № 4. С. 829–833.
18. Жарова Г. В., Янилкин Ю. В. Комплекс программ ЭГАК. Алгоритм выравнивания давлений веществ в смешанных ячейках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 3. С. 77–82.
19. Бондаренко Ю. А., Янилкин Ю. В. Расчет термодинамических параметров смешанных ячеек в газовой динамике // Математическое моделирование. 2002. Т. 14, № 6. С. 63–81.
20. Гончаров Е. А., Колобянин В. Ю., Янилкин Ю. В. Метод замыкания уравнений лагранжевой газодинамики в смешанных ячейках, основанный на равенстве скоростей компонентов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 4. С. 100–105.
21. Янилкин Ю. В., Колобянин В. Ю., Чистякова И. Н., Егужова М. Ю. Применение метода РРМ в расчетах по методикам ЭГАК и ТРЭК // Там же. 2005. Вып. 4. С. 69–79.
22. Янилкин Ю. В., Топорова О. О., Колобянин В. Ю., Фирсова Г. С. Об одной форме искусственной вязкости // Там же. 2009. Вып. 3. С. 45–57.
23. Гаврилова Е. С., Янилкин Ю. В., Горбенко А. Д. Программа контроля скорости детонации в комплексе программ ТРЭК++ // Сб. докл. Второй науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". 2003. С. 89–94.
24. Код ЭГИДА-2D для моделирования двумерных задач: Уч. пособие. В 2 томах / Под ред. Ю. В. Янилкина. Саров: ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2008.
25. Евстигнеев А. А., Зубарев В. Н. Уравнения состояния продуктов взрыва конденсированных ВВ // ФГВ. 1984. № 6. С. 114–118.
26. Dobratz V. M. LLNL Explosives Handbook. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulation. LLNL, 1981. UCRL-52997.

Статья поступила в редакцию 11.05.10.

Переработанный вариант статьи —
13.11.10.