

УДК 544.454.3:534.222.2

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ СОГЛАСОВАННАЯ МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЕТОНАЦИИ ТВЕРДОГО ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА С ИНЕРТНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ НА ДИФFUЗНОЙ ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА

М. Yu^{1,2}, Z.-B. Ma³

¹Center for Applied Physics and Technology, and College of Engineering, Peking University, Beijing 100871 P. R. China, yu_ming@iapcm.ac.cn

²National Key Laboratory for Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100083, P. R. China

³Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, P. R. China

Предложена улучшенная модель диффузной границы раздела, описывающая взаимодействие детонации твердого взрывчатого вещества и сжимаемых инертных материалов. Химический процесс упрощен, поскольку твердофазный реагент превращается в газофазный продукт. Таким образом, считается, что смесь в контрольном объеме состоит из трех компонентов: твердофазный реагент (взрывчатое вещество), газофазный продукт и инертный материал. Из-за различия термодинамических свойств предполагается, что три компонента находятся в механическом равновесии и термически неравновесном состоянии. Уравнение изменения объемной доли каждого компонента выводится из условия производства энтропии и условия равенства давлений в компонентах. В модель также добавлено уравнение для давления смеси. Таким образом, модель диффузной границы раздела включает в себя следующие основные уравнения: сохранения массы каждого компонента, сохранения импульса и полной энергии смеси, изменения объемной доли каждого компонента, изменения давления смеси. Важными характеристиками предлагаемой модели являются одновременный учет массопереноса в химической реакции и теплообмена в условиях тепловой неравновесности, а также прямой расчет зависимости давления от времени. Предлагаемая модель обладает термодинамической согласованностью, что позволяет эффективно устранять нефизические колебания вблизи границы раздела. Между тем она может применяться к произвольным выражениям уравнения состояния, учитывать любое количество инертных материалов, а также использоваться для расчетов в условиях большего отношения плотностей на границе раздела материалов.

Ключевые слова: модель диффузной границы контакта, детонация в твердом взрывчатом веществе, модель многофазного потока, термическая неравновесность, термодинамическая согласованность.

DOI 10.15372/FGV20220109

ВВЕДЕНИЕ

Детонация представляет собой тип ударного гидродинамического процесса, который сопровождается быстрым выделением энергии в результате химических реакций [1]. Из-за высокой температуры и давления детонация твердого взрывчатого вещества (ВВ) может производить огромную термодинамическую работу по перемещению и сжатию материалов, поэтому она широко применяется в промышленности и военной технике. Возможность предсказывать движение детонационной волны во взрывном устройстве и реакцию инертного материала на оказываемое давление зависит от

способности моделировать и понимать динамику взаимодействия при детонации твердого ВВ и инертных твердых материалов. Таким образом, эта проблема взаимодействия является важной областью исследований прикладной физики.

Данная задача может быть решена с помощью уравнений сжимаемой гидродинамики многих материалов под воздействием высоких температур и давлений, создаваемых детонацией твердого ВВ. Помимо ударной волны, волны разрежения и контактной неоднородности в сжимаемом потоке одиночного материала, в потоке нескольких материалов появляется еще один разрыв, а именно граница разде-

ла материалов. Границы разделяют материалы с различными термодинамическими свойствами или разными уравнениями состояния (УРС), что, по сути, является еще одной категорией неоднородности, которая должна сохранять равенство давления и скорости на границе раздела материалов. Основная трудность численного моделирования задачи заключается в точном вычислении движения границы раздела материалов. Традиционный численный подход к моделированию потоков нескольких материалов основан на методах Лагранжа [2–4], в которых расчетные сетки связаны с движущимися частицами жидкости, а граница раздела материалов отслеживается автоматически. Методы Лагранжа неизбежно потерпят неудачу, если произойдет искажение сетки, вызванное большой деформацией движения. Хорошей альтернативой методам Лагранжа является подход, основанный на методах Эйлера [4, 5], в которых расчетные сетки фиксированы, а граница раздела захватывается «смешивающими ячейками». Главным преимуществом методов Эйлера является способность обходить большие деформации движения материала с достаточной точностью.

В основном выделяют четыре класса методов Эйлера: метод отслеживания фронта [6, 7], метод объема жидкости [8, 9], метод установки уровня [10, 11] и метод диффузной границы раздела. Идея метода диффузной границы раздела состоит в том, что контрольный объем определяется как ячейка смеси, содержащая несколько материалов или компонентов, а граница раздела материалов рассматривается как диффузная или искусственно перемешиваемая зона конечной ширины. Таким образом, после того, как задана координатная сетка правила смешения для описания термодинамических свойств смеси, вычисляется объемная доля каждого материала в ячейке, но расположение границы раздела не требует вычислений. По сравнению с другими классами методов Эйлера метод диффузной границы раздела обладает рядом заметных преимуществ. Тот же набор управляющих уравнений применяется для описания всего поля течения нескольких материалов, и для решения управляющих уравнений принимается уникальная схема улавливания скачков уплотнения. Химическая реакция учитывается в модели таким же образом, как и зона искусственного перемешивания вокруг границы раздела материалов. Законы со-

хранения массы, импульса и полной энергии смеси и каждого компонента хорошо соблюдаются. Трехмерная или топологически сложная граница раздела материалов может обрабатываться напрямую без дополнительных процедур реконструкции или интерполяции. Граница раздела с материалом, который изначально отсутствует, может быть создана динамически, а граница с материалом, который изначально присутствует, может динамически исчезать. Благодаря этим преимуществам метод диффузной границы раздела в последнее время получил широкое распространение [12].

Ключевой задачей метода диффузной границы контакта является построение правила микширования звука искусственной смеси. Исходя из различных способов моделирования смешения, метод диффузной границы раздела может быть подразделен на расширенные модели Эйлера и многофазные модели типа Баера — Нунциато [13]. Расширенные модели Эйлера предполагают отсутствие механического и термического равновесия во время смешивания компонентов и оперируют потоком из нескольких материалов с помощью уравнений сохранения массы, импульса и полной энергии, а также дополнительных уравнений зависимости массовых долей компонентов от времени. Хорошо известно, что когда границы раздела материалов могут существовать внутри ячейки, а все компоненты с различными термодинамическими свойствами не могут иметь одинаковую температуру или находиться в термическом равновесии, тогда применение расширенных моделей Эйлера приводит к существенной потере термодинамической согласованности с реальным физическим состоянием и, соответственно, обеспечивает ошибочное УРС смеси. Термодинамическая несогласованность обычно приводит к тому, что численные решения этих моделей предсказывают нефизические колебания вблизи границ раздела материалов [14, 15], и для их устранения принимаются дополнительные меры [16–19].

Альтернативой расширенным моделям Эйлера, которая дает более точные предсказания, являются многофазные модели типа Баера — Нунциато [20], которые рассматривают каждый компонент смеси как отдельную фазу и допускают равновесное или неравновесное состояние в механических и тепловых взаимодействиях. Следовательно, для каждой фазы записываются собственные уравнения

сохранения массы, импульса и полной энергии. Кроме того, добавляется уравнение зависимости объемной доли каждой фазы от времени, чтобы замкнуть приведенные выше уравнения сохранения, а исходные члены включены для описания обмена массой, импульсом и энергией между фазами. Уравнения изменения фаз и смеси должны удовлетворять второму началу термодинамики. В частности, принимая во внимание конкретную физическую задачу и соотношения между характерными масштабами физических переменных, полные модели Баера — Нунциато с полной неравновесностью могут быть упрощены до моделей Баера — Нунциато с частичной неравновесностью. Например, в работах [21] и [22] представлены наиболее характерные редуцированные модели, в которых принимается предположение о механическом равновесии и тепловой неравновесности, а именно сохраняются равенство давлений и различие температур между фазами. Очевидно, что многофазные модели типа Баера — Нунциато могут по своей сути поддерживать термодинамическую согласованность с реальным физическим состоянием и, следовательно, давать точные численные решения со свободными нефизическими колебаниями. Именно термодинамическая согласованность привлекает всё большее внимание [23] к многофазным моделям типа Баера — Нунциато.

Для задачи взаимодействия детонации твердого ВВ со сжимаемыми инертными материалами описание чрезвычайно сложных процессов необратимого превращения твердофазного реагента в газофазный продукт можно упростить. Смесь в контрольном объеме может рассматриваться как состоящая из трех компонентов: твердофазный реагент, газофазный продукт и сжимаемые инертные материалы. Поскольку эти составляющие материалы имеют совершенно разные термодинамические свойства, характерное время процесса тепловой релаксации смеси значительно больше, чем время механической релаксации, так что давление и скорость могут достигать состояния равновесия, а температура и внутренняя энергия не могут этого достичь из-за перемешивания [24–27]. Следовательно, в задаче взаимодействия при перемешивании можно сделать допущение о механическом равновесии и тепловой неравновесности. Кроме того, численные решения без колебаний очень важны для описа-

ния химических процессов детонации. Поскольку химический процесс при детонации зависит от давления и плотности, нефизические колебания давления и плотности могут усиливать скорость химического процесса, предсказывая заведомо неверные кинетические параметры. Поэтому скорость и интенсивность детонационной волны должны быть скорректированы, чтобы правильно предсказать детонационную ударную нагрузку на инертные материалы. Таким образом, проблема взаимодействия при перемешивании требует моделей, которые не дают колебаний в решении, чтобы точно предсказать скорость химических процессов детонации.

Исходя из предположения о механическом равновесии и отсутствии термического равновесия, можно использовать сходство с моделью [21]. Внесение некоторых усовершенствований позволяет получить новую термодинамически согласованную модель диффузной границы раздела. К таким улучшениям относятся учет влияния химических реакций и температурных различий в источниковых членах уравнений, а также устранение двух недостатков модели [21]. Первый недостаток заключается в том, что в управляющих уравнениях модели [21] принимается единое давление для всех компонентов, но численное решение уравнений этой модели по-прежнему вводит множественные давления для всех компонентов, чтобы можно было итерировать до идентичного значения. Способ обработки делает основные уравнения отличными от уравнений, решаемых численно. Второй недостаток заключается в том, что УРС многокомпонентной смеси выражается в виде, аналогичном УРС отдельного материала. Как отмечалось в [28], способ обработки также разрушает термодинамическую стабильность гидродинамики системы, состоящей из нескольких материалов. Чтобы преодолеть эти два недостатка, приходится отказываться от определения УРС многокомпонентной системы и непосредственно решать уравнение для одного давления.

Нашей отправной точкой для вывода уравнения для объемной доли каждого компонента в улучшенной модели диффузной границы раздела является использование условия производства энтропии и равенства давлений между компонентами в заданном объеме. Полученное уравнение для объемной доли одновременно учитывает эффекты массопереноса, благо-

даря химическим превращениям, и теплообмена, благодаря тепловой неравновесности. В то же время к этой модели необходимо добавить уравнение изменения давления смеси. Итак, в основные уравнения предложенной модели диффузной поверхности раздела входят: уравнение сохранения массы каждого компонента, уравнения сохранения импульса и полной энергии смеси, уравнение для определения объемной доли каждого компонента и уравнение для давления. Необходимо отметить, что давление вычисляется непосредственно из решения основных уравнений, а не из вычислений переменных потока, как это обычно принято. Прямое определение давления помогает избежать определения УРС смеси для обеспечения термодинамической согласованности. Это особенно важно для смеси, состоящей из компонентов с сильно нелинейными УРС, что часто приводит к серьезным ошибкам [19].

Предлагаемая модель диффузной границы раздела может быть решена численно методом расщепления Стренга [4], который разбивает модельную систему на два гиперболических шага и шаг источника. В расчетах используется дискретизация конечного объема второго порядка. Консервативный гиперболический шаг использует решающую программу HLLC традиционной схемы Годунова, а неконсервативный гиперболический шаг — идею адвекции Годунова с сохранением положительности [29]. Шаг источникового члена использует полуневяную схему Рунге — Кутты третьего порядка [30]. Из нескольких численных примеров предлагаемая модель диффузной границы раздела может устранить нефизические колебания вблизи границы раздела материалов, давая возможность применять модель для больших отношений плотности.

Статья организована следующим образом. В § 1 выводятся формулы улучшенной модели, в § 2 приведена схема численного расчета по этой модели, в § 3 представлены некоторые численные примеры.

1. ФОРМУЛЫ УЛУЧШЕННОЙ МОДЕЛИ ДИФFUЗНОЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА

Рассмотрим контрольный объем, содержащий три компонента: твердофазный реагент (ВВ), газофазный продукт и инертные материалы. Переменные, относящиеся к твердофазному веществу, обозначены индексом s , параметры газофазного продукта — индексом g , а

переменные, относящиеся к инертным материалам, — индексом $m = 1, 2, \dots, M$, где M — общее число инертных материалов. Пусть ρ обозначает плотность, e — удельную внутреннюю энергию, p — давление, u — скорость, α — объемную долю, v — удельный объем. Таким образом, при механическом равновесии параметры смеси определяются следующим образом:

$$\rho = \rho_s \alpha_s + \rho_g \alpha_g + \sum_{m=1}^M \rho_m \alpha_m, \quad (1.1)$$

$$\rho e = \rho_s \alpha_s e_s + \rho_g \alpha_g e_g + \sum_{m=1}^M \rho_m \alpha_m e_m, \quad (1.2)$$

$$p = p_s = p_g = p_m, \quad m = 1, 2, \dots, M, \quad (1.3)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_s = \mathbf{u}_g = \mathbf{u}_m, \quad m = 1, 2, \dots, M, \quad (1.4)$$

$$\alpha_s = \frac{v_s}{v}, \quad \alpha_g = \frac{v_g}{v}, \quad \alpha_m = \frac{v_m}{v}, \quad (1.5)$$

$$m = 1, 2, \dots, M,$$

$$\alpha_s + \alpha_g + \sum_{m=1}^M \alpha_m = 1. \quad (1.6)$$

В предположении механического равновесия с одним значением давления и скорости уравнения, описывающие сжимаемый поток, состоящий из нескольких материалов, с химическими превращениями, соответствуют модели Капи-лы [21] и выражаются следующим образом:

$$\frac{\partial \rho_s \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_s \alpha_s \mathbf{u} = -\rho_s \alpha_s r, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho_g \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_g \alpha_g \mathbf{u} = \rho_s \alpha_s r, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho_m \alpha_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_m \alpha_m \mathbf{u} = 0, \quad (2.3)$$

$$m = 1, 2, \dots, M,$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = \mathbf{0}, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E + p) \mathbf{u} = 0, \quad (2.5)$$

где $E = e + \mathbf{u}^2/2$ — полная энергия, r — скорость химического процесса при детонации,

$\mathbf{I}$ — единичный тензор. Уравнение (2.1) представляет собой закон сохранения массы твердофазного реагента, уравнение (2.2) — закон сохранения массы газофазного продукта, уравнение (2.3) — закон сохранения массы инертных материалов, уравнение (2.4) — закон сохранения количества движения смеси, уравнение (2.5) — закон сохранения полной энергии смеси.

Для метода диффузной границы раздела, если дано уравнение для объемной доли каждого компонента, система дифференциальных уравнений (2.1)–(2.5) может получить определенное решение. Чтобы вывести уравнение для объемной доли каждого компонента, используется условие производства энтропии и равенства давлений между компонентами в контрольном объеме.

С помощью уравнений сохранения массы всех компонентов и сохранения количества движения смеси уравнение сохранения полной энергии смеси можно преобразовать в уравнение удельной внутренней энергии в виде производной по материалам:

$$\frac{de}{dt} + p \frac{dv}{dt} = 0, \quad k = s, g, 1, 2, \dots, M. \quad (3)$$

Применяя уравнение (3) к каждому компоненту и учитывая теплообмен между компонентами, уравнение производства энтропии каждого компонента можно записать в виде

$$T_k \frac{ds_k}{dt} = \frac{de_k}{dt} + p \frac{dv_k}{dt} = q_k, \quad k = s, g, 1, 2, \dots, M, \quad (4)$$

где s_k и T_k — соответственно энтропия и температура каждого компонента, q_k — скорость теплообмена каждого компонента благодаря различию температур.

Уравнение равенства давлений каждого компонента между собой, без ограничения общности, позволяет давлению быть функцией плотности и удельной внутренней энергии:

$$p = p_k(\rho_k, e_k), \quad k = s, g, 1, 2, \dots, M. \quad (5)$$

Как пример, приведем вывод уравнения для объемной доли твердофазного реагента по следующей процедуре. Подставляем выражение $v_s = 1/\rho_s$ и уравнение (2.1) в уравнение (4) и получаем

$$\frac{de_s}{dt} + \frac{p}{\rho_s \alpha_s} \frac{d\alpha_s}{dt} + \frac{p}{\rho_s} \nabla \cdot \mathbf{u} = -\frac{p}{\rho_s} r + q_s. \quad (6)$$

Далее, дифференцируя уравнение (5) и подставляя уравнение (2.1), приходим к выражению

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} = & -\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} r - \rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} \nabla \cdot \mathbf{u} - \\ & - \frac{\rho_s}{\alpha_s} \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} \frac{d\alpha_s}{dt} + \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \frac{de_s}{dt}. \end{aligned} \quad (7)$$

Подставляя в него уравнение (6), перепишем уравнение (7) в виде

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} = & -\left(\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s}\right) r + \\ & + \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s - \left(\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s}\right) \nabla \cdot \mathbf{u} - \\ & - \frac{1}{\alpha_s} \left(\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s}\right) \frac{d\alpha_s}{dt}. \end{aligned} \quad (8)$$

Уравнение (8) можно преобразовать в приведенное ниже:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_s}{dt} = & -\alpha_s \left\{ r - \left[\frac{\partial p_s}{\partial e_s} / \left(\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) \right] q_s \right\} - \\ & - \alpha_s \nabla \cdot \mathbf{u} - \left[\alpha_s / \left(\rho_s \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} \right) \right] \frac{dp}{dt}. \end{aligned} \quad (9)$$

Аналогичные преобразования выполняются с уравнениями для газофазных продуктов и инертных материалов, поэтому объемные доли всех компонентов выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_s}{dt} = & \left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) - \\ & - \alpha_s \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{dp}{dt}, \end{aligned} \quad (10.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_g}{dt} = & \left(\frac{\rho_s \alpha_s}{\rho_g} r + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} q_g \right) - \\ & - \alpha_g \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \frac{dp}{dt}, \end{aligned} \quad (10.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_m}{dt} = & \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m} q_m - \alpha_m \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{dp}{dt}, \\ m = & 1, 2, \dots, M, \end{aligned} \quad (10.3)$$

где $c_s^2 = \frac{\partial p_s}{\partial \rho_s} + \frac{p}{\rho_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s}$, $c_g^2 = \frac{\partial p_g}{\partial \rho_g} + \frac{p}{\rho_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g}$,
 $c_m^2 = \frac{\partial p_m}{\partial \rho_m} + \frac{p}{\rho_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m}$. Суммируя уравнения
(10.1)–(10.3), а затем используя равенство $\alpha_s +$
 $\alpha_g + \sum_{m=1}^M \alpha_m = 1$, получаем выражение для дав-
ления смеси:

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} + \rho c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = \rho c^2 \left[\left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{\rho_s \alpha_s}{\rho_g} r + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} q_g \right) + \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^M \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m} q_m \right], \quad (11) \end{aligned}$$

где $\frac{1}{\rho c^2} = \frac{1}{\rho_s c_s^2} + \frac{1}{\rho_g c_g^2} + \sum_{m=1}^M \frac{1}{\rho_m c_m^2}$. После под-
становки уравнения (11) в уравнения (10.1)–
(10.3) зависимости для объемной доли всех ком-
понентов принимают окончательный вид. Для
твердофазного реагента имеем выражение

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_s}{dt} + \alpha_s \left(1 - \frac{\rho c^2}{\rho_s c_s^2} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} = \\ = \left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) - \\ - \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \rho c^2 \left[\left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{\rho_s \alpha_s}{\rho_g} r + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} q_g \right) + \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^M \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m} q_m \right]. \quad (12) \end{aligned}$$

Таким образом, улучшенная модель диффуз-
ной границы раздела полностью выведена, и
ее главные уравнения могут быть выражены
в следующей форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_s \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_s \alpha_s \mathbf{u} = -\rho_s \alpha_s r, \\ \frac{\partial \rho_g \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_g \alpha_g \mathbf{u} = \rho_s \alpha_s r, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho_m \alpha_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_m \alpha_m \mathbf{u} = 0, \quad m = 1, 2, \dots, M,$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = \mathbf{0},$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E + p) \mathbf{u} = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_s \mathbf{u} - \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \rho c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = \\ = \left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) - \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \rho c^2 \times \\ \times \left[\left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{\rho_s \alpha_s}{\rho_g} r + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} q_g \right) + \sum_{m=1}^M \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m} q_m \right], \quad (13) \\ \frac{\partial \alpha_m}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_m \mathbf{u} - \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \rho c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = \\ = \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m} q_m - \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \rho c^2 \times \\ \times \left[\left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) + \left(\frac{\rho_s \alpha_s}{\rho_g} r + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} q_g \right) + \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^M \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m} q_m \right], \quad m = 1, 2, \dots, M, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot p \mathbf{u} - (p - \rho c^2) \nabla \cdot \mathbf{u} = \\ = \rho c^2 \left[\left(-\alpha_s r + \frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \frac{\partial p_s}{\partial e_s} q_s \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{\rho_s \alpha_s}{\rho_g} r + \frac{\alpha_g}{\rho_g c_g^2} \frac{\partial p_g}{\partial e_g} q_g \right) + \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^M \frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \frac{\partial p_m}{\partial e_m} q_m \right], \end{aligned}$$

где скорость теплообмена можно взять в ви-
де $q_k = \sum v_k \nabla \cdot (\kappa_k \nabla T_k)$ (κ — температу-
роводность; $k = s, g, 1, 2, \dots, M$) [31] с диф-
фузионным свойством. Уравнения для объем-
ных долей компонентов учитывают массопере-
нос в химических превращениях со скоростью

r и теплообмен из-за тепловой неравновесности со скоростью q_k . Уравнение изменения давления смеси также включено в модель для непосредственного решения. Такое вычисление давления помогает избегать определения УРС смеси для обеспечения термодинамической согласованности.

Приведенная выше процедура вывода делает предлагаемую модель очень гибкой. Допускается произвольное выражение УРС для компонента, которое (например, $p = p_k(\rho_k, T_k)$ и $e_k = e_k(\rho_k, T_k)$) часто встречается в инженерных приложениях. Количество задействованных инертных материалов не ограничено. Между тем расчет для чистой многокомпонентной гидродинамики без химической реакции также допустим только при $r = 0$.

2. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Предложенная модель диффузной границы раздела (13) представляет собой неоднородную смешанную парабологиперболическую систему дифференциальных уравнений, представляющих собой производные второго порядка по фазовым температурам, и может быть численно решена методом расщепления Стренга. Оператор расщепления делит эту систему на три шага последовательного решения: первый шаг для консервативного гиперболического закона, второй — для неконсервативного гиперболического закона, третий — для исходных членов, которые содержат скорость реакции r и скорость обмена q_k . Итак, для дискретизации системы (13) необходимо решить следующую систему:

$$\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{h})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{h})}{\partial y} = 0, \quad (14.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \frac{\partial u\mathbf{w}}{\partial x} + \frac{\partial v\mathbf{w}}{\partial y} + \\ + \mathbf{a}(\mathbf{q}) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0, \end{aligned} \quad (14.2)$$

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{s}(\mathbf{q}) = \mathbf{s}_N(\mathbf{q}) + \mathbf{s}_S(\mathbf{q}). \quad (14.3)$$

Здесь

$$\begin{cases} \mathbf{h} = [\rho_s \alpha_s, \rho_g \alpha_g, \rho_m \alpha_m, \rho u, \rho v, \rho E]^T, \\ \mathbf{f}(\mathbf{h}) = [\rho_s \alpha_s u, \rho_g \alpha_g u, \rho_m \alpha_m u, \rho u^2 + p, \rho uv, \\ \quad \quad \quad (\rho E + p)u]^T, \\ \mathbf{g}(\mathbf{h}) = [\rho_s \alpha_s v, \rho_g \alpha_g v, \rho_m \alpha_m v, \rho vu, \rho v^2 + p, \\ \quad \quad \quad (\rho E + p)v]^T, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathbf{w} = [\alpha_s, \alpha_m, p]^T, \\ \mathbf{a}(\mathbf{q}) = \left[-\frac{\alpha_s}{\rho_s c_s^2} \rho c^2, -\frac{\alpha_m}{\rho_m c_m^2} \rho c^2, -(p - \rho c^2) \right]^T, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mathbf{q} = [\rho_s \alpha_s, \rho_g \alpha_g, \rho_m \alpha_m, \rho u, \rho v, \rho E, \alpha_s, \\ \quad \quad \quad \alpha_m, p]^T, \\ \mathbf{s}(\mathbf{q}) = [-\rho_s \alpha_s r, \rho_s \alpha_s r, 0, 0, 0, 0, \Pi_s, \\ \quad \quad \quad \Pi_m, \Pi_p]^T, \end{cases}$$

$$m = 1, 2, \dots, M,$$

где $\mathbf{s}_N(\mathbf{q})$ — нежесткая часть источникового члена уравнения $\mathbf{s}(\mathbf{q})$; $\mathbf{s}_S(\mathbf{q})$ — жесткая часть источникового члена $\mathbf{s}(\mathbf{q})$; Π_s, Π_m, Π_p — соответствующие члены правой части уравнений в последних трех выражениях.

Обозначим через $\mathbf{L}_{HC}(\cdot)$ оператор первого шага, $\mathbf{L}_{HN}(\cdot)$ — оператор второго шага, $\mathbf{L}_S(\cdot)$ — оператор третьего шага. Тогда схема расщепления Стренга системы уравнений (13) может быть выражена следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{n+1} = \\ = \mathbf{L}_S\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \mathbf{L}_{HN}(\Delta t) \mathbf{L}_{HC}(\Delta t) \mathbf{L}_S\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \mathbf{q}^n. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь Δt — временной шаг, ограниченный глобальными условиями сходимости CFL (Куранта — Фридрихса — Леви).

Схема метода конечного объема со структурированными сетками принята для дискретизации области расчетного пространства. Обозначим через A площадь дискретного четырехугольника, ограниченного четырьмя граничными сегментами с единичным вектором $\mathbf{n}_l = (\cos \theta, \sin \theta)_l$ внешней нормали и длиной $L_l, l = 1, \dots, 4$ (здесь θ — угол между граничным сегментом и осью x).

Дискретизация конечного объема уравнения (14.1) по консервативному гиперболическому закону с традиционной схемой Годунова означает, что

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_{ij}^{n+1} = \\ = \mathbf{h}_{ij}^n - \frac{\Delta t}{A_{ij}} \sum_{l=1}^4 L_l (\mathbf{f}_l^* \cdot \cos \theta_l + \mathbf{g}_l^* \cdot \sin \theta_l), \end{aligned} \quad (16)$$

где $\mathbf{f}^*$ и $\mathbf{g}^*$ — численные потоки, рассчитанные по программе HLLC [29] при решении задачи

Римана для системы уравнений (14), которая задается левым и правым состояниями, разделенными граничным сегментом четырехугольника. Скорости волн в левом и правом состояниях граничного сегмента определяются формулами

$$S_L = \min(u_L - c_L, \bar{u} - \bar{c}),$$

$$S_R = \max(u_R + c_R, \bar{u} + \bar{c}),$$

где $\bar{u}$ и $\bar{c}$ оценены по средней шкале Роу. Скорость распространения среднего состояния или контактного разрыва оценивается по формуле

$$S^* = [\rho_R u_R (S_R - u_R) - \rho_L u_L (S_L - u_L) + (p_L - p_R)] / [\rho_R (S_R - u_R) - \rho_L (S_L - u_L)].$$

Дискретизация конечного объема уравнения (14.2) по консервативному гиперболическому закону с идеей адвекции Годунова означает, что

$$\begin{aligned} w_{ij}^{n+1} = w_{ij}^n - \frac{\Delta t}{A_{ij}} \sum_{l=1}^4 L_l [(uw)_l^* \cos \theta_l + \\ + (vw)_l^* \sin \theta_l - a_{ij}^n (u_l^* \cos \theta_l + v_l^* \sin \theta_l)], \end{aligned} \quad (17)$$

где $(uw)^*$, $(vw)^*$, u^* , v^* — числовые потоки среднего состояния из задачи Римана, полученные при дискретизации уравнения (16).

Для расширения пространственной дискретизации в уравнениях (16) и (17) до второго порядка точности используется реконструкция MUSCL [29].

Полунеявная схема Рунге — Кутты третьего порядка [30] используется для интегрирования уравнения (14.3) по времени:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \Delta t [\mathbf{I} - a_1 \Delta t \mathbf{J}(\mathbf{q}^n)]^{-1} [\mathbf{s}_N(\mathbf{q}^n) + \mathbf{s}_S(\mathbf{q}^n)], \\ \mathbf{k}_2 &= \Delta t [\mathbf{I} - a_2 \Delta t \mathbf{J}(\mathbf{q}^n)]^{-1} [\mathbf{s}_N(\mathbf{q}^n + b_{21} \mathbf{k}_1) + \\ &\quad + \mathbf{s}_S(\mathbf{q}^n + c_{21} \mathbf{k}_1)], \\ \mathbf{k}_3 &= \\ &= \Delta t [\mathbf{I} - a_3 \Delta t \mathbf{J}(\mathbf{q}^n)]^{-1} [\mathbf{s}_N(\mathbf{q}^n + b_{31} \mathbf{k}_1 + b_{32} \mathbf{k}_2) + \\ &\quad + \mathbf{s}_S(\mathbf{q}^n + c_{31} \mathbf{k}_1 + c_{32} \mathbf{k}_2)], \end{aligned} \quad (18)$$

$$\mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \omega_1 \mathbf{k}_1 + \omega_2 \mathbf{k}_2 + \omega_3 \mathbf{k}_3,$$

где матрица якобиана $\mathbf{J}(\mathbf{q}) = \frac{\partial \mathbf{s}_S(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}$ связана с жесткой частью источникового члена, а часть производной второго порядка $q_k = \sum v_k \nabla \cdot (\kappa_k \nabla T_k)$ ($k = s, g, 1, 2, \dots, M$) источникового члена дискретизируется центрированным приближением с безусловной устойчивостью [32].

Стоит отметить, что применительно к идее Годунова обновленная схема (17) для неконсервативных гиперболических уравнений может эффективно сохранять положительность объемной доли и давления смеси, чтобы избежать сбоя вычислений или потери точности.

3. ЧИСЛЕННЫЕ ПРИМЕРЫ

Первые три приведенных здесь примера предназначены для одномерных задач, а последние два — для двумерных задач.

Хотя наша модель не ограничивает тип УРС, во всех вариантах, рассматриваемых в этой статье, используется очень популярное УРС Ми — Грюнайзена в виде

$$p = p_{ref} + \Gamma \rho (e - e_{ref}), \quad \Gamma \rho = \Gamma_0 \rho_0,$$

где Γ_0 — коэффициент Грюнайзена, ρ_0 — начальная плотность.

В зависимости от того, как выражены эталонное давление и эталонная энергия в УРС Ми — Грюнайзена, могут быть получены различные модели УРС. Для твердофазного и газофазного продукта горения ВВ эталонное давление и эталонная энергия в широко используемом уравнении Джонса — Уилкинса — Ли (JWL) имеют вид:

$$\begin{aligned} p_{ref} &= A \exp \left(- \frac{R_1 \rho_0}{\rho} \right) + B \exp \left(- \frac{R_2 \rho_0}{\rho} \right), \\ e_{ref} &= \frac{A}{R_1 \rho_0} \exp \left(- \frac{R_1 \rho_0}{\rho} \right) + \\ &\quad + \frac{B}{R_2 \rho_0} \exp \left(- \frac{R_2 \rho_0}{\rho} \right) - e_0, \end{aligned}$$

где ρ_0 , e_0 , A , B , R_1 , R_2 — характеристики конкретного ВВ. Для твердых инертных материалов эталонные давление и энергия выражаются через уравнения НОМ EOS вида

$$p_{ref} = \frac{c_0^2 (1/\rho_0 - 1/\rho)}{[1/\rho_0 - s(1/\rho_0 - 1/\rho)]^2},$$

$$e_{ref} = \frac{1}{2} \left[\frac{c_0(1/\rho_0 - 1/\rho)}{1/\rho_0 - s(1/\rho_0 - 1/\rho)} \right]^2.$$

Здесь ρ_0 , c_0 , s — характеристики конкретных инертных материалов, а эталонное давление определяется его линейным соотношением Гюгоню: $D = c_0 + su_p$, где D — скорость распространения ударной волны, u_p — скорость частиц после ударной волны.

Скорость химических превращений, используемая в данной работе, рассчитывается на основе известной модели воспламенения — роста:

$$\begin{aligned} r = & I(1 - \lambda)^b (\rho_0/\rho - 1 - a)^x H(\lambda_{I \max} - \lambda) + \\ & + G_1(1 - \lambda)^c \lambda^d p^y H(\lambda_{G_1 \max} - \lambda) + \\ & + G_2(1 - \lambda)^e \lambda^g p^z H(\lambda - \lambda_{G_2 \max}), \end{aligned}$$

где λ — массовая доля газофазного продукта реагирования ВВ, $H(\cdot)$ — функция Хевисайда, I , G_1 , G_2 , $\lambda_{I \max}$, $\lambda_{G_1 \max}$, $\lambda_{G_2 \max}$, a , b , c , d , e , g , x , y , z — характеристики конкретного ВВ.

3.1. Задача Римана

Рассмотрим взаимодействие газофазного продукта бризантного ВВ на основе полимерного связующего РВХ 9502 с медной пластиной. Это чисто газодинамическая задача без учета химических превращений, и она используется для иллюстрации характера свободных пульсаций численных решений, получаемых с помощью предложенной модели.

Расчетная область простирается на $0 \div 1$ см, а граница раздела с исходным материалом расположена на расстоянии 0.5 см. Начальные условия на левой стороне границы раздела ($x < 0.5$ см) для газофазного продукта приведены ниже:

$$\rho = 2.5165 \text{ г/см}^3, \quad u = 0, \quad p = 0.2753 \text{ Мбар},$$

$$\alpha_s = \varepsilon, \quad \alpha_g = 1.0 - 2\varepsilon, \quad \alpha_1 = \varepsilon.$$

Начальные условия в правой части ($x > 0.5$ см) границы раздела с медью выглядят так:

$$\rho = 8.90 \text{ г/см}^3, \quad u = 0, \quad p = 1.01 \cdot 10^{-6} \text{ Мбар},$$

$$\alpha_s = \varepsilon, \quad \alpha_g = \varepsilon, \quad \alpha_1 = 1.0 - 2\varepsilon.$$

Здесь ε — малое число, задаваемое равным $\varepsilon = 10^{-6}$. Размер ячейки составляет $\Delta x = 1/100, 1/200, 1/400$ см, что позволяет проверить пространственную конвергенцию.

УРС продукта принимает вид уравнения Джонса — Уилкинса — Ли с параметрами [33]:

$$\rho_0 = 1.895 \text{ г/см}^3, \quad e_0 = 0.069 \text{ Мбар/г},$$

$$A = 13.6177 \text{ Мбар}, \quad B = 0.7199 \text{ Мбар},$$

$$R_1 = 6.2, \quad R_2 = 2.2, \quad \Gamma_0 = 0.5.$$

УРС меди принимает вид выражения НОМ [34] с параметрами [35]:

$$\rho_0 = 8.90 \text{ г/см}^3, \quad c_0 = 0.394 \text{ см/мкс},$$

$$s = 1.489, \quad \Gamma_0 = 1.98.$$

Эта задача описывает газофазный продукт при высоком давлении в состоянии Чепмена — Жу-ге, который воздействует на медь при атмосферном давлении. Ее решение включает в себя сильную ударную волну, распространяющуюся вправо в сторону меди, и волны расширения, распространяющиеся влево в продукте. Рассчитанные профили плотности, давления и скорости формируются за время $t = 0.60$ мкс, одновременно получаются точные решения. Сравнение результатов расчетов с точными решениями (рис. 1) свидетельствует о прекрасном согласии и сходимости. Также обнаружено, что нефизические колебания не появляются вблизи границы раздела продукт — медь, которая переместилась на расстояние $x = 0.531$ см.

3.2. Иницирование ударной волны и распространение детонации в твердых ВВ

Рассмотрим иницирование ударной волны и распространение детонации в бризантном ВВ РВХ 9502. Это задача, включающая только химические превращения, без инертного материала, используется для иллюстрации возможности численного моделирования химических процессов в предложенной модели.

В этой задаче пластина твердого ВВ врезается в неподвижную стенку, а затем внутри ВВ около стены генерируется ударная волна. Ее высокое давление запускает химические процессы, превращающие твердофазный реагент в газофазный продукт. После этого происходит детонация, которая в конечном итоге переходит в стационарный режим.

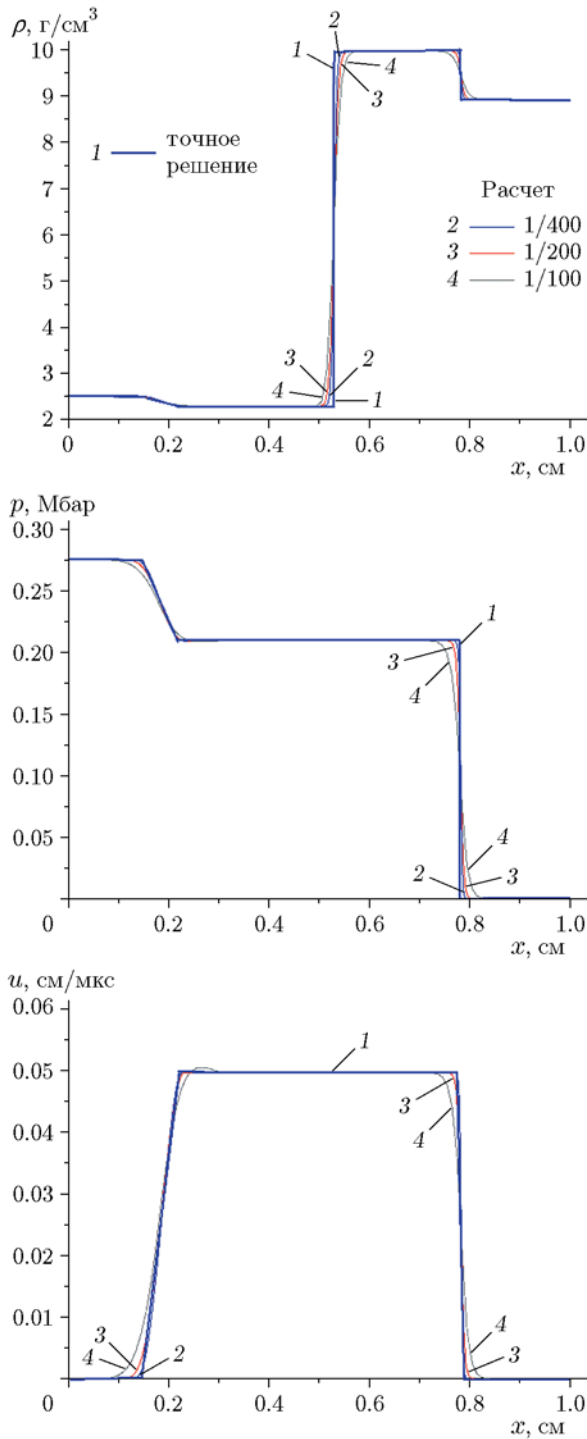


Рис. 1. Сравнение результатов решения задачи Римана

Длина образца ВВ равна 4.0 см, и всё ВВ представляет собой расчетную область со следующими начальными условиями:

$$\rho = 1.895 \text{ г/см}^3, \quad u = -0.1075 \text{ см/мкс},$$

$$p = 1.01 \cdot 10^{-6} \text{ Мбар},$$

$$\alpha_s = 1.0 - 2\varepsilon, \quad \alpha_g = \varepsilon, \quad \alpha_1 = \varepsilon.$$

Размер ячейки координатной сетки составляет 1/1000 см, а левая граница расчетной области задана как твердая стенка.

Уравнение состояния твердофазного реагента имеет вид уравнения Джонса — Уилкинса — Ли с параметрами [33]:

$$\rho_0 = 1.895 \text{ г/см}^3, \quad e_0 = 0,$$

$$A = 632.07 \text{ Мбар}, \quad B = -0.04472 \text{ Мбар},$$

$$R_1 = 11.3, \quad R_2 = 1.13, \quad \Gamma_0 = 0.8938.$$

Уравнение состояния газофазного продукта имеет вид уравнения Джонса — Уилкинса — Ли с параметрами [33]:

$$\rho_0 = 1.895 \text{ г/см}^3, \quad e_0 = 0.069 \text{ Мбар/г},$$

$$A = 13.6177 \text{ Мбар}, \quad B = 0.7199 \text{ Мбар},$$

$$R_1 = 6.2, \quad R_2 = 2.2, \quad \Gamma_0 = 0.5,$$

$$I = 4.0 \cdot 10^6, \quad G_1 = 1100, \quad G_2 = 30,$$

$$a = 0.214, \quad b = 0.667, \quad c = 0.667, \quad d = 1.0,$$

$$e = 0.667, \quad g = 0.667, \quad x = 7.0, \quad y = 1.0, \quad z = 2.0,$$

$$\lambda_{I \max} = 0.025, \quad \lambda_{G_1 \max} = 0.8, \quad \lambda_{G_2 \max} = 0.8.$$

На рис. 2 показано изменение давления во время воспламенения и распространения детонации. На рис. 2,а время зажигания составляло $t = 0 \div 1.9$ мкс с шагом 0.1 мкс, на рис. 2,б — время распространения $t = 1.9 \div 5.5$ мкс с шагом 0.2 мкс. Как видно на рис. 2,а, в течение всего процесса интенсивность ведущей ударной волны медленно увеличивается и генерируется импульс давления, смещающийся сначала от стенки, а затем во внутреннее пространство ВВ. Импульс давления постепенно нарастает и со временем образует вторичную ударную волну за ведущей ударной волной. При непрерывном росте давления в ведущей ударной волне вторичная ударная волна догоняет ведущую, образуя единую ударную волну. На

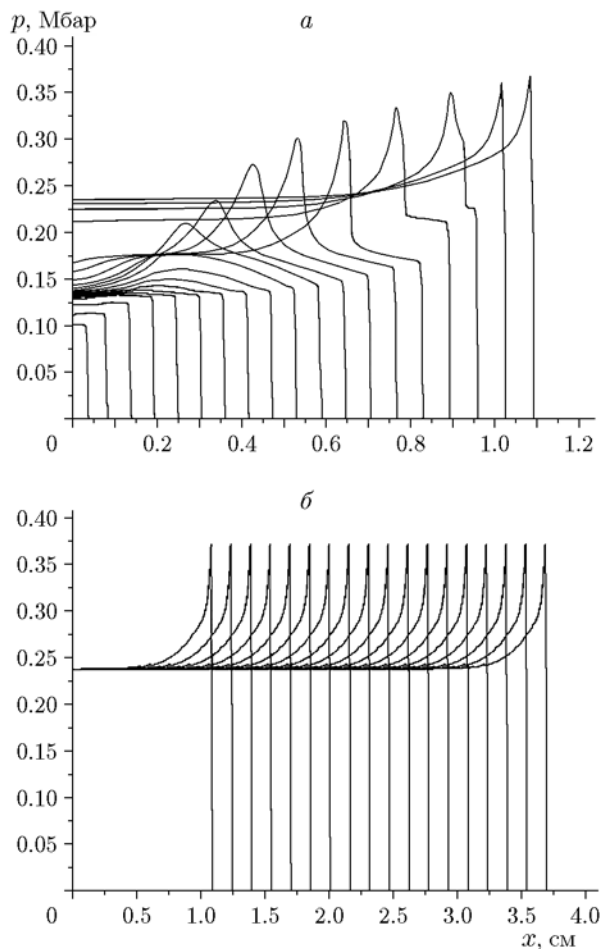


Рис. 2. Профили давления при инициировании (а) и распространении детонации в твердой фазе (б):

а — время зажигания $t = 0 \div 1.9$ мкс, шаг 0.1 мкс, б — время распространения $t = 1.9 \div 5.5$ мкс, шаг 0.2 мкс

нижнем рисунке вышеупомянутая объединяющаяся ударная волна образует сильный скачок уплотнения и продолжает двигаться вперед. В конечном итоге волна достигает определенного состояния и становится детонационной волной, конец которой удовлетворяет условию Чепмена — Жуге, а высота волны обозначена как пик фон Неймана.

Как видно на рис. 2, полученные данные моделирования совпадают с результатом [36]. Расчетные значения давления Чепмена — Жуге, скорости распространения Чепмена — Жуге и давления фон Неймана составляют $p_{CJ} = 0.2749$ Мбар, $D_{CJ} = 0.7665$ см/мкс и $p_N = 0.3667$ Мбар соответственно. Теоретические значения этих характеристик таковы:

$p_{CJ} = 0.2753$ Мбар, $D_{CJ} = 0.7669$ см/мкс, $p_N = 0.3687$ Мбар. Таким образом, данные расчетов превосходно согласуются с теоретическими результатами.

3.3. Движение металла под действием высокого давления

Предположим, что газофазный продукт детонации ВВ PBX 9502 смещает медный лист. Длина образца 2.0 см, давление продукта 0.365 Мбар, толщина листа меди 0.5 см. Между зарядом и медным листом имеется воздушный зазор толщиной 0.5 см, а справа от меди — воздушный буфер толщиной 1.0 см. Этот пример иллюстрирует способность предложенной модели предсказывать ситуации с большими перепадами плотности на границах раздела материалов.

Начальные условия таковы.

Расчетная область для продукта сгорания при высоком давлении $0 \leq x < 2.0$ см:

$$\rho = 2.5165 \text{ г/см}^3, u = 0, p = 0.3687 \text{ Мбар},$$

$$\alpha_s = \varepsilon, \alpha_g = 1.0 - 3\varepsilon, \alpha_1 = \varepsilon, \alpha_2 = \varepsilon.$$

Расчетная область для воздушного зазора $2.0 \leq x < 2.5$ см:

$$\rho = 0.0013 \text{ г/см}^3, u = 0, p = 1.01 \cdot 10^{-6} \text{ Мбар},$$

$$\alpha_s = \varepsilon, \alpha_g = \varepsilon, \alpha_1 = \varepsilon, \alpha_2 = 1.0 - 3\varepsilon.$$

Расчетная область для листа меди $2.5 \leq x \leq 3.0$ см:

$$\rho = 8.90 \text{ г/см}^3, u = 0, p = 1.01 \cdot 10^{-6} \text{ Мбар},$$

$$\alpha_s = \varepsilon, \alpha_g = \varepsilon, \alpha_1 = 1.0 - 3\varepsilon, \alpha_2 = \varepsilon.$$

Расчетная область для буферного воздуха $3.0 \leq x < 4.0$ см:

$$\rho = 0.0013 \text{ г/см}^3, u = 0, p = 1.01 \cdot 10^{-6} \text{ Мбар},$$

$$\alpha_s = \varepsilon, \alpha_g = \varepsilon, \alpha_1 = \varepsilon, \alpha_2 = 1.0 - 3\varepsilon.$$

Здесь медный материал обозначен индексом 1, воздух — индексом 2.

Размер ячейки координатной сетки $\Delta x = 1/200$ см.

УРС газофазного продукта и медной пластины имеют такой же вид, что и в примере 3.1. УРС воздуха описывается уравнением для идеального газа $p = (\gamma - 1)\rho e$, $\gamma = 1.4$.

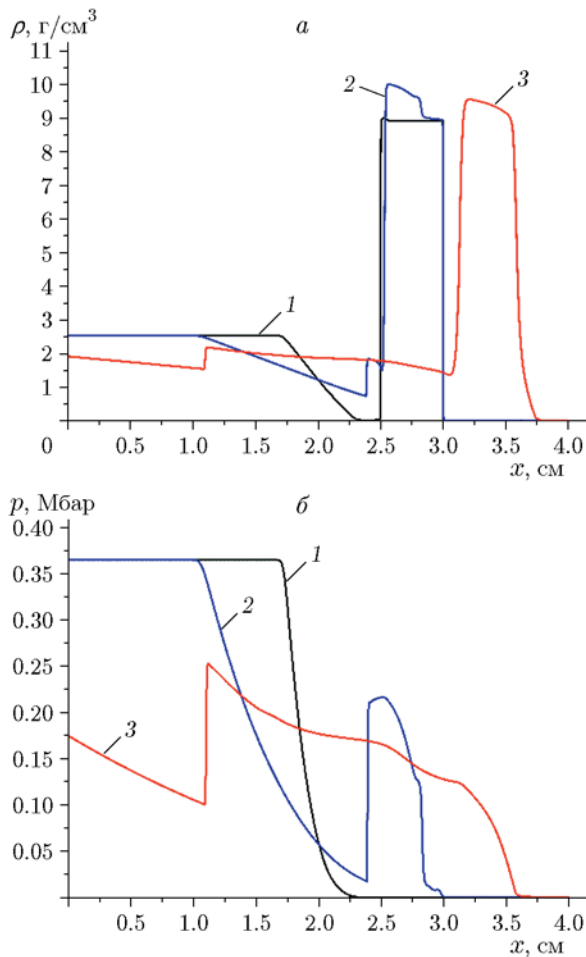


Рис. 3. Профили плотности (а) и давления (б)

В этой задаче начальное отношение плотности ВВ к воздуху составляет около 1 500 : 1, а меди к воздуху — около 7 000 : 1. Как правило, такие большие отношения плотностей являются сложной задачей для многих численных методов. Профили распределения плотности и давления в характерные моменты времени $t = 0.45, 1.50, 6.0$ мкс показаны на рис. 3.

После попадания ВВ под высоким давлением в воздушный зазор создается сильная волна разрежения из-за очень низкой относительной плотности воздуха. Давление взрывчатки уменьшается, а давление в воздушном зазоре увеличивается с образованием ударной волны (линия 1 на рис. 3). Ударная волна продолжает двигаться вправо и входит в медный лист, что приводит к возникновению другой ударной волны (линия 2 на рис. 3). Ударная волна внутри меди проходит через ее границу раздела и затем попадает в воздушный буфер, что при-

водит к возникновению еще одной волны разрежения в меди (линия 3 на рис. 3). Согласно численным результатам левая и правая границы раздела медного листа сместились вправо примерно на 0.641 и 0.597 см соответственно в момент времени $t = 6.0$ мкс. Судя по полученным результатам, предложенная модель хорошо подходит для моделирования объектов с большими отношениями плотностей, превышающими 1 000 : 1.

3.4. Распространение детонации в ограниченном пространстве

Рассмотрим распространение устойчивой детонационной волны в твердом ВВ РВХ 9502 в медной оболочке. Этот сценарий используется для иллюстрации возможности численных расчетов двумерных задач предложенной моделью.

На рис. 4 показана расчетная область. Расчетная область имеет длину 8.0 см и высоту 2.5 см, зона меди — соответственно 8.0 см и 0.5 см, а вспомогательная зона — 0.4 см и 2.0 см. Дополнительная зона для инициирования ВВ заполнена неподвижным газофазным продуктом с давлением 0.2753 Мбар, а остальные зоны находятся в исходном состоянии.

Верхнее граничное условие задается как твердая стенка, на левой границе задаются постоянные величины, а остальные граничные условия являются неотраженными состояниями. Размер ячейки координатной сетки составляет $\Delta x = 1/200$ см. УРС газофазного продукта, твердофазного реагента и скорость химических превращений ВВ имеют тот же вид, что и в примере 3.2, а УРС для меди соответствуют уравнениям в примере 3.1.

Предсказанные распределения (в стационарном режиме) плотности, давления и массовой доли газофазного продукта показаны на

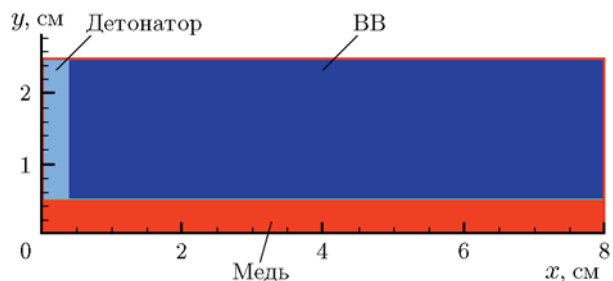


Рис. 4. Конфигурация образца для изучения детонации в замкнутом пространстве

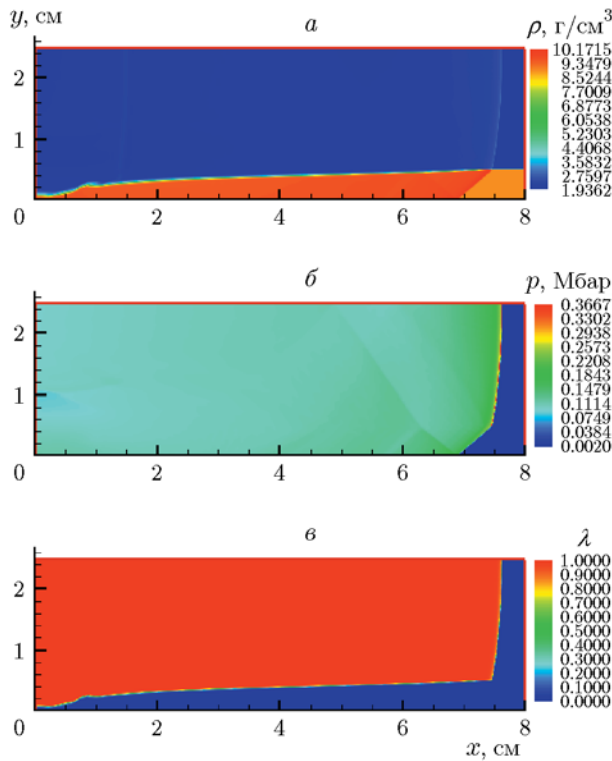


Рис. 5. Распределение плотности (*а*), давления (*б*) и массовой доли (*в*) газозных продуктов детонации

рис. 5. Из-за высокого давления внутри газозного продукта поверхность раздела между ВВ и медью подвергается воздействию и выгибается наружу, в то время как ударная волна отражается внутрь меди. В результате сброса давления вблизи границы раздела ВВ — медь передний ударный фронт детонационной волны искривляется, а передний фронт ударной волны вдали от границы раздела остается прямым. В стационарном режиме весь передний фронт ударной волны движется со скоростью Чепмена — Жуке в горизонтальном направлении. Из результатов расчетов следует, что скорость детонационной волны Чепмена — Жуке составляет около 0.7662 см/мкс, а согласно теоретическому анализу [37] при параметрах, заданных в УРС, она равняется 0.7669 см/мкс. Из сказанного выше ясно, что данные моделирования и теоретические результаты находятся в хорошем согласии. Физические переменные сглаживаются по линии границы раздела, взятой из массовой доли газозного продукта.

На рис. 6 показана структура стационарного потока около границы раздела ма-

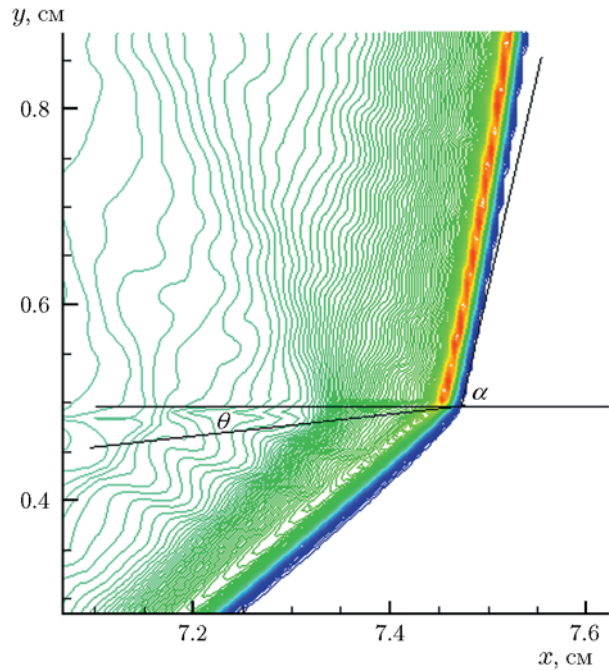


Рис. 6. Стационарное поле течений около границы раздела

териалов. Химические процессы замедляются, что приводит к искривлению фронта передней ударной волны. Согласно полученным данным, угол кромки переднего фронта ударной волны составляет 78.9° , а угол отклонения линии тока на поверхности раздела — 4.86° . Из ударно-полярного анализа детонационного потока [37] мы получаем формулу для краевого угла

$$\alpha = \arcsin \left(\frac{1}{D_{CJ}} \sqrt{\frac{p - p_0}{\rho_0(1 - \rho_0/\rho)}} \right),$$

а угол отклонения рассчитывается по формуле

$$\theta = \arctg \frac{\sqrt{\rho_0 p (1 - \rho_0/\rho) (D_{CJ}/\sin \alpha)^2 - p^2}}{\rho_0 (D_{CJ}/\sin \alpha)^2 - p}.$$

Рассчитанные по этим формулам углы равны 79.7° и 4.77° соответственно. Значения углов, предсказанные моделью и рассчитанные теоретически, отлично согласуются между собой. Кроме того, отражающая волна не возникает в газозном продукте, когда передний фронт детонационной волны отражается в медь. Причина этого заключается в том, что поток за передним ударным фронтом детонационной волны имеет дозвуковую скорость. Это согласуется с результатами ударно-полярного анализа [37].

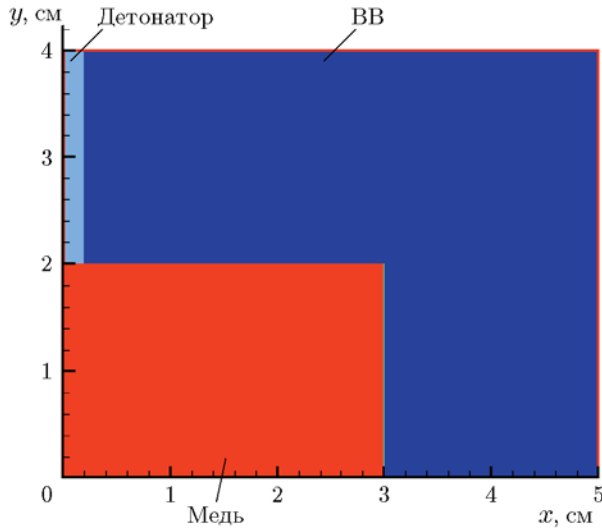


Рис. 7. Конфигурация расчетной области для изучения дифракции детонационной волны

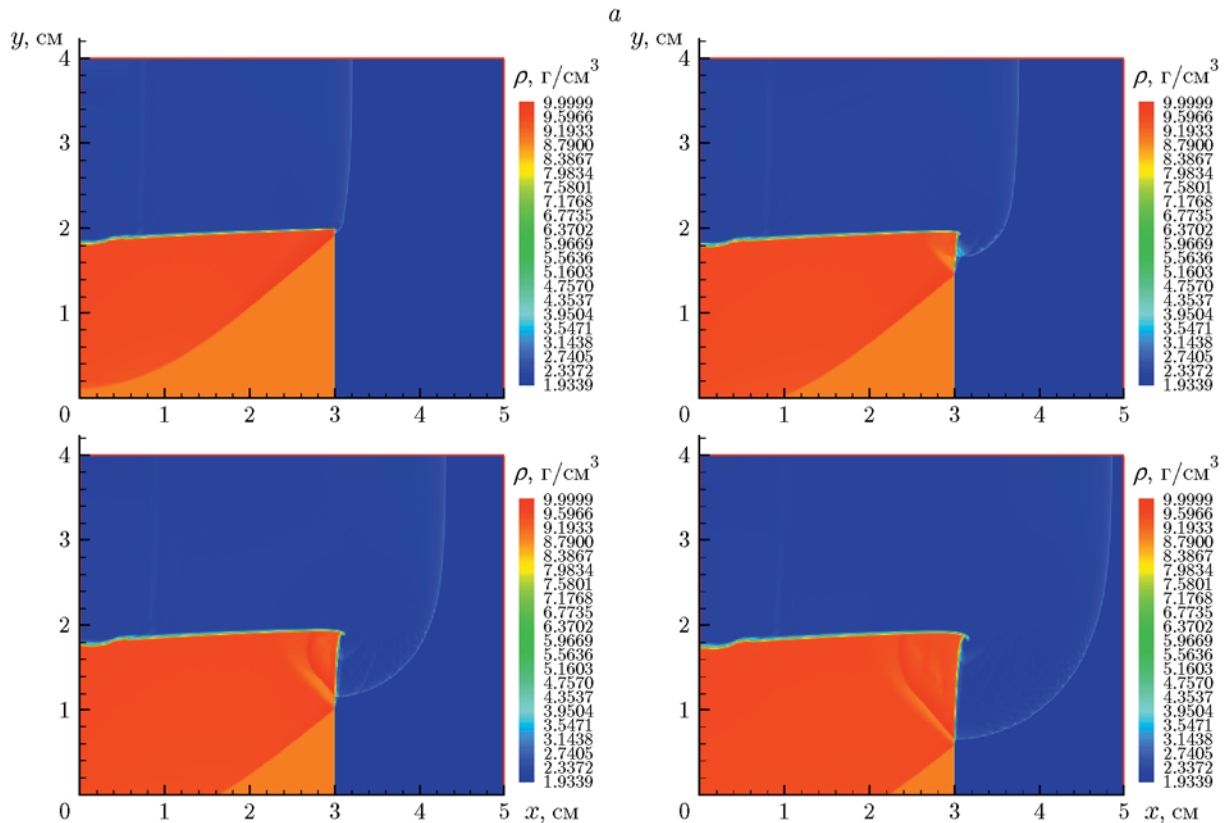
3.5. Дифракция плоской ударной волны

Рассмотрим плоскую стационарную детонационную волну Чепмена — Жуге в РВХ 9502, которая огибает край медной пластины под углом 90° . Этот сценарий используется для иллюстрации возможности числен-

ного моделирования двумерных сложных задач гидродинамики с помощью предложенной модели.

Данная конфигурация показана на рис. 7. Фактически геометрия состоит из двух каналов — узкого и резко расширяющегося. В начальный момент детонация Чепмена — Жуге находится во вспомогательной зоне, а остальные зоны находятся в исходных состояниях. Граничное условие на входе поддерживает состояние Чепмена — Жуге в течение всего времени, а остальные граничные условия задаются как твердые стенки. Размер ячейки координатной сетки $\Delta x = 1/200$ см. УРС газозафазного продукта и твердофазного реагента, а также скорость химической реакции ВВ такие же, как в примере 3.2, а УРС для меди такие же, как в примере 3.1.

На рис. 8 показаны предсказанные моделью изменения плотности, давления и массовой доли продукта в моменты времени $t = 4.25, 5.00, 5.75$ и 6.50 мкс. В результате преломления детонационной волны, движущейся вправо по меди, в ней возникает ударная волна. Эта волна (в меди) распространяется быстрее, чем дифракционная детонационная волна вблизи границы раздела. Судя по профилю плот-



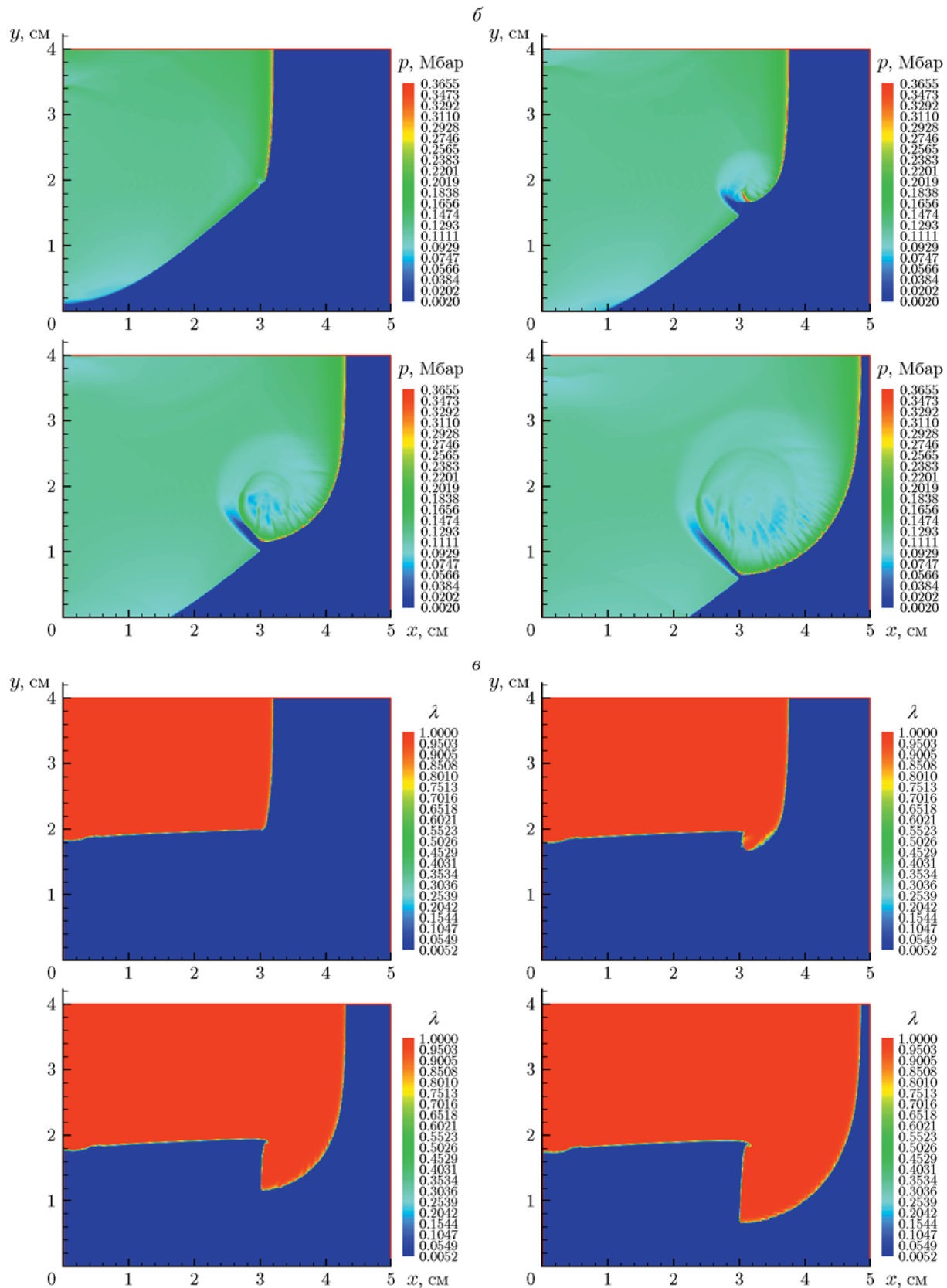


Рис. 8. Поля плотности (а), давления (б) и массовой доли (в) продукта при дифракции детонации в моменты времени $t = 4.25, 5.00, 5.75, 6.50$ мкс

ности, когда волна детонации достигает угла медной пластины, фронт детонационной волны вблизи границы раздела материалов искривляется и отстает от верхней части детонационной волны. В это время в результате преломления ударной волны, движущейся по меди, в ВВ распространяется другая ударная волна, которая является причиной предварительного сжатия непрореагировавшего ВВ [37, 38]. Из контуров давления видно, что две ударные волны отражаются от границы раздела с медью, создавая две волны разрежения. Затем две волны разрежения встречаются внутри меди, что создает в меди зону низкого давления. Из зависимости массовой доли продукта понятно, что когда волна детонации выходит за угол, химические превращения не завершаются полностью, и зона реакции становится шире (здесь максимальная ширина составляет около 0.30 см, а ширина в плоском и стационарном состоянии составляет около 0.12 см). При непрерывном распространении детонационной волны увеличение давления за ней постепенно приводит к завершению химических превращений. Однако химическая реакция вблизи угла медной пластины не протекает до конца. Как видно по профилям давления и массовой доли, зависимости вблизи границы раздела материалов являются гладкими.

ВЫВОДЫ

В статье предложена термодинамически согласованная численная модель диффузной границы раздела взаимодействия между детонацией твердых взрывчатых веществ и сжимаемыми инертными материалами. Уравнения, описывающие временные зависимости объемных долей в предположении механического равновесия и отсутствия термического равновесия компонентов, учитывают массоперенос за счет химических превращений и теплообмен. К основному уравнению модели добавлено уравнение временной зависимости давления смеси, чтобы придать модели термодинамическую согласованность. При использовании двумерного кода, моделирующего взаимодействие между детонирующим твердым ВВ и инертным материалом, для решения уравнения для давления требуется менее 10 % вычислительных затрат. Предлагаемая модель может применяться к произвольному виду уравнения состояния и учитывать любое количество инертных

материалов. Численные примеры демонстрируют, что предложенная модель может устранить нефизические колебания вблизи границы раздела и работать с материалами с большим отношением плотностей. Данная модель диффузной границы раздела может быть применена для множества физических задач, таких как упругая пластическая динамика сжимаемых инертных материалов [39].

Настоящее исследование выполнено при поддержке National Natural Science Foundation of China (grants N 11772066 и 11272064), Science Challenge Project of China Academy of Engineering Physics (grant N TZT2016002), Innovation Foundation of China Academy of Engineering Physics (grant N CX2019026).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Fickett W., Davis W. C.** Detonation: Theory and Experiment. — New York: Dover, 1979.
2. **Von Neumann J., Richtmyer R. D.** A method for the numerical calculations of hydrodynamical shocks // J. Appl. Phys. — 1950. — V. 21, N 3. — P. 232–238. — DOI: 10.1063/1.1699639.
3. **Wilkins M. L.** Calculation of elastic-plastic flow // Methods in Computational Physics. — New York: Acad. Press, 1964. — V. 3.
4. **Benson D. J.** Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. — 1992. — V. 99, N 2-3. — P. 235–394. — DOI: 10.1016/0045-7825(92)90042-I.
5. **Benson D. J.** A multi-material Eulerian formulation for the efficient solution of impact and penetration problems // Comput. Mech. — 1995. — V. 5, N 6. — P. 558–571. — DOI: 10.1007/BF00350268.
6. **Glimm J., Isaacson E., Marchesin D., McBryan O.** Front tracking for hyperbolic systems // Adv. Appl. Math. — 1981. — V. 2, N 1. — P. 91–119. — DOI: 10.1016/0196-8858(81)90040-3.
7. **Tryggvason G., Bunner B., Esmaeeli A., et al.** A front-tracking method for the computations of multiphase flow // J. Comput. Phys. — 2001. — V. 169, N 2. — P. 708–759. — DOI: 10.1006/jcph.2001.6726.
8. **Hirt C., Nichols B.** Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // J. Comput. Phys. — 1981. — V. 39, N 1. — P. 201–225. — DOI: 10.1016/0021-9991(81)90145-5.
9. **Saurel R., Abgrall R.** A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows // J. Comput. Phys. — 1999. — V. 150, N 2. — P. 425–467. — DOI: 10.1006/jcph.1999.6187.

10. **Sussman M., Smereka P., Osher S.** A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow // *J. Comput. Phys.* — 1994. — V. 114, N 1. — P. 146–159. — DOI: 10.1006/jcph.1994.1155.
11. **Aslam T. D., Bdzil J. B., Stewart D. S.** Level set method applied to modeling detonation shock dynamics // *Mech. Sci. Eng.* — 1996. — V. 126, N 2. — P. 390–409. — DOI: 10.1006/jcph.1996.0145.
12. **Nguyen N. T.** Numerical methods for compressible multi-phase flows with surface tension: Ph. D. Thesis. — University of Trento, April 2017.
13. **Michael L., Nikiforakis N.** A hybrid formulation for the numerical simulation of condensed phase explosives // *J. Comput. Phys.* — 2016. — V. 316. — P. 193–217. — DOI: 10.1016/j.jcp.2016.04.017.
14. **Karni S.** Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm // *J. Comput. Phys.* — 1994. — V. 112, N 1. — P. 31–43. — DOI: 10.1006/jcph.1994.1080.
15. **Ton V. T.** Improved shock-capturing methods for multicomponent and reacting flows // *J. Comput. Phys.* — 1996. — V. 128, N 1. — P. 237–253. — DOI: 10.1006/jcph.1996.0206.
16. **Shyue K.** An efficient shock-capturing algorithm for compressible multicomponent problems // *J. Comput. Phys.* — 1998. — V. 142, N 1. — P. 208–242. — DOI: 10.1006/jcph.1998.5930.
17. **Wang S.-P., Anderson M. H., Oakley J., Corradini M., Bonazza R.** A thermodynamically consistent and fully conservative treatment of contact discontinuities for compressible multicomponent flows // *J. Comput. Phys.* — 2004. — V. 195, N 2. — P. 528–559. — DOI: 10.1016/j.jcp.2003.10.010.
18. **Banks J. W., Schwendeman D. W., Kapila A. K., Henshaw W. D.** A high-resolution Godunov method for compressible multi-material flow on overlapping grids // *J. Comput. Phys.* — 2007. — V. 223, N 1. — P. 262–297. — DOI: 10.1016/j.jcp.2006.09.014.
19. **Lee B. J., Toro E. F., Castro C. E., Nikiforakis N.** Adaptive Osher-type scheme for the Euler equations with highly nonlinear equations of state // *J. Comput. Phys.* — 2013. — V. 246. — P. 165–183. — DOI: 10.1016/j.jcp.2013.03.046.
20. **Baer M. R., Nunziato J. W.** A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1986. — V. 12, N 6. — P. 861–889. — DOI: 10.1016/0301-9322(86)90033-9.
21. **Kapila A. K., Menikoff R., Bdzil J. B., Son S. F.** Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations // *Phys. Fluids.* — 2001. — V. 13, N 10. — P. 3002–3024. — DOI: 10.1063/1.1398042.
22. **Saurel R., Petitpas F., Berry R. A.** Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures // *J. Comput. Phys.* — 2009. — V. 228, N 5. — P. 1678–1712. — DOI: 10.1016/j.jcp.2008.11.002.
23. **Saurel R., Pantano C.** Diffuse-interface capturing methods for compressible two-phase flows // *Annu. Rev. Fluid Mech.* — 2018. — V. 50. — P. 105–130. — DOI: 10.1146/annurev-fluid-122316-050109.
24. **Baer M. R., Kipp M. E.** Micromechanical modeling of heterogeneous energetic materials // *Proc. of the 11th Int. Detonation Symp., Snowmass, CO, United States.* — 1998. — P. 788–797.
25. **Handley C. A., Lambourn B. D., Whitworth N. J., James H. R., Belfield W. J.** Understanding the shock and detonation response of high explosives at the continuum and meso scales // *Appl. Phys. Rev.* — 2018. — V. 5. — 011303. — DOI: 10.1063/1.5005997.
26. **Zhang F.** Shock Wave Science and Technology Reference Library. Detonation Dynamics. — Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2012. — V. 6.
27. **Findik F.** Recent developments in explosive welding // *Mater. Design.* — 2011. — V. 32, N 3. — P. 1081–1093. — DOI: 10.1016/j.matdes.2010.10.017.
28. **Grove J. W.** Some comments on thermodynamic consistency for equilibrium mixture equations of state // *Comput. Math. with Applications.* — 2019. — V. 78, N 2. — P. 582–597. — DOI: 10.1016/j.camwa.2018.03.012.
29. **Toro E. F.** Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. — 2nd ed. — Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1999.
30. **Zhong X.-L.** Additive semi-implicit Runge — Kutta methods for computing high-speed nonequilibrium reactive flows // *J. Comput. Phys.* — 1996. — V. 128, N 1. — P. 19–31. — DOI: 10.1006/jcph.1996.0193.
31. **Castor J.** Radiation Hydrodynamics. — Cambridge Univ. Press, 2004.
32. **LeVeque R. J.** Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. — Cambridge Univ. Press, 2004.
33. **Tarver C. M., McGuire E. M.** Reactive flow modeling of the interaction of TATB detonation waves with inert materials // *The 12th Symp. (Int.) on Detonation, San Diego, California.* — 2002. — P. 641–649.
34. **Marsh S. P.** LASL Shock Hugoniot Data. — Berkeley: Univ. of California Press, 1980.
35. **Shyue K.-M.** A fluid-mixture type algorithm for compressible multicomponent flow with Mie — Grüneisen equation of state // *J. Comput. Phys.* — 2001. — V. 171, N 2. — P. 678–707. — DOI: 10.1006/jcph.2001.6801.
36. **Gustavsen R. L., Sheffield S. A., Alcon R. R.** Measurements of shock initiation in the

- tri-amino-tri-nitro-benzene based explosive PBX 9502: Wave forms from embedded gauges and comparison of four different material lots // J. Appl. Phys. — 2006. — V. 99, N 11. — 114907. — DOI: 10.1063/1.2195191.
37. **Short M., Quirk J. J.** High explosive detonation–confiner interactions // Annu. Rev. Fluid Mech. — 2018. — V. 50. — P. 215–242. — DOI: 10.1146/annurev-fluid-122316-045011.
38. **Schoch S., Nikiforakis N., Lee B. J.** The propagation of detonation waves in non-ideal condensed-phase explosives confined by high sound-speed materials // Phys. Fluids. — 2013. — V. 25, N 8. — 086102. — DOI: 10.1063/1.4817069.
39. **Schoch S., Nordin-Bates K., Nikiforakis N.** A Eulerian algorithm for coupled simulation of elastoplastic-solids and condensed-phase explosives // J. Comput. Phys. — 2013. — V. 252, N 9. — P. 163–194. — DOI: 10.1016/j.jcp.2013.06.020.

Поступила в редакцию 29.01.2021.

После доработки 23.04.2021.

Принята к публикации 09.06.2021.
