

На правах рукописи

Немцев Максим Юрьевич

Численное моделирование процессов горения пористых энергетических
материалов в широком диапазоне объемной доли

Специальность 1.2.2 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2023

Работа выполнена в ИПМ им. М.В. Келдыша

Научный руководитель: Меньшов Игорь Станиславович, д.ф.-м.н.,
главный научный сотрудник
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Официальные оппоненты: Русяк Иван Григорьевич, д.т.н., профессор,
заведующий кафедрой
«Прикладная математика и информационные
технологии» ИжГТУ

Гидаспов Владимир Юрьевич, д.ф.-м.н.,
ведущий научный сотрудник НИУ МАИ

Ведущая организация: ФГБУН Федеральный исследовательский
центр химической физики им. Н.Н. Семенова
РАН

Защита состоится 21 декабря 2023 г. в 11:00 часов на заседании
диссертационного совета 24.1.237.01, созданного на базе ИПМ им. М.В.
Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ им.
М.В. Келдыша РАН <https://www.keldysh.ru/council/3/>

Автореферат разослан __. __. 2023 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
к.ф.-м.н.

М.А. Корнилина

Общая характеристика работы:

Актуальность темы работы:

Многофазные течения дисперсных смесей, когда объемная доля дисперсной фазы изменяется в широком диапазоне, от значений разреженных практически невзаимодействующих частиц до значений плотной упаковки, встречаются во многих прикладных задачах, например, при исследовании процессов внутренней баллистики^{1,2}, диспергирования пылевых слоев за ударными волнами³, распространения детонации в дисперсных системах⁴ и др.

При исследовании задач внутренней баллистики в качестве дисперсной фазы рассматривается множество зерен энергетического материала. При этом объемная доля дисперсной фазы изменяется как в результате горения зерен, так и в результате движения под действием газовой фазы, состоящей из образующихся продуктов горения и воздуха. При этом значения объемной доли пороховых зарядов изменяются от плотной упаковки до сильно разреженных частиц. Другая особенность внутрибаллистического процесса - поведение давления внутри ствола. В течение внутрибаллистического процесса происходит рост давления в заснарядном пространстве за счет горения пороха, а также снижение давления за счет увеличения заснарядного объема при движении снаряда. Таким образом, зависимость давления от времени в заснарядном пространстве имеет характерный локальный максимум.

Изучение внутрибаллистического процесса преследует цель оптимизации конфигурации заряда и ствола орудия. Примерно до середины XIX века для исследования были доступны эмпирические тесты максимального давления разрыва ствола, а также дальности метания снаряда. Развитием методов исследования послужило внедрение крешеров, которые представляют собой медные металлические цилиндры, по деформации которых можно судить о величине максимального давления. К середине XX широкое распространение получили пьезоэлектрические датчики давления позволяющие производить локальные измерения давления при выстреле.

Ограниченность экспериментальных методов исследования и развитие математических методов привели к созданию математической модели внутрибаллистического процесса. На сегодняшний день актуальным является мо-

¹Menshov I. S., Nemtsev M. Y., Semenov I. V. Numerical Modeling of Wave Processes Accompanying Combustion of Inhomogeneously Distributed Composite Propellant //Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2019. – Т. 59. – №. 9. – С. 1528-1541.

²Ищенко А.Н., Касимов В.З. Математическое моделирование внутрибаллистических процессов в ствольных системах. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999, 255 с.

³Fan B. C. et al. Interaction of a shock wave with a loose dusty bulk layer //Shock Waves. – 2007. – Т. 16. – №. 3. – С. 179-187.

⁴Baer M. R., Nunziato J. W. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials //International journal of multiphase flow. – 1986. – Т. 12. – №. 6. – С. 861-889.

делирование внутрибаллистического процесса в газодинамической постановке. В результате такого моделирования можно получить распределения всех параметров течения в заснарядном пространстве в интересующие моменты времени, а не только в местах расположения датчиков. Полученные данные позволяют детально отслеживать развитие таких нежелательных эффектов, как волновой процесс, сопровождающих выстрел с неоднородным распределением энергетического материала (ЭМ)¹.

Развитие артиллерийских систем связано с повышением скорости метаемога тела при выходе из ствола. Одним из способов достижения данной цели является увеличение плотности заряжания. Вместе с тем, для снижения максимального давления необходимо обеспечить повышение прогрессивности горения энергетического материала, что может быть достигнуто за счет покрытия зерен, составляющих блок, полимерной пленкой с дальнейшим прессованием их до высокой плотности в блочный ЭМ. Таким образом данный способ реализует идею управления горением энергетического материала. Подбор и оптимизация блочных ЭМ производятся эмпирическим путем, поэтому разработка математических моделей, вычислительных алгоритмов и их программная реализация являются необходимыми стадиями создания эффективного инструмента для более глубокого изучения процессов, происходящих при горении высокоплотных ЭМ.

Цели и задачи диссертационной работы:

Целью работы является создание физико-математической модели, вычислительного алгоритма и программных модулей для моделирования процессов в конвективного горения в энергетическом материале (ВЗКГ:высокоплотный заряд конвективного горения), состоящем из пороховых зерен, покрытых полимерной пленкой в двухфазном эйлеровом приближении. Для достижения основной цели исследования необходимо решение следующих задач:

- Разработка модели воспламенения и пиролиза полимерной пленки.
- Регуляризация модели двухфазного течения Р.И.Нигматулина.
- Построение численного метода годуновского типа для регуляризованной модели.
- Разработка вычислительных алгоритмов и программных модулей для реализации модели конвективного горения энергетического материала, покрытого полимерной пленкой и спрессованного до высокой объемной доли.
- Проведение верификации и валидации работы реализованных вычислительных алгоритмов на решении модельных задач.

- Численное исследование процесса горения высокоплотного энергетического материала в экспериментальной установке с дожигательной секцией.

Научная новизна:

Предложена математическая модель горения пористого энергетического материала покрытого пленкой полимера. Модель учитывает многокомпонентный состав газовой и дисперсной фазы, процессы воспламенения, пиролиза пленки и горения энергетического материала по неполной поверхности в широком диапазоне его объемной доли. Проведена регуляризация на дискретном уровне неэволюционной модели движения двухфазной смеси газа с твердыми частицами (зернами) и получена термодинамически согласованная гиперболическая модель. Для полученной модели построен численный метод Годуновского типа, использующий приближенное решение задачи Римана типа HLL и учитывающий возможность образования областей без частиц. Предложенная математическая модель алгоритмически и программно реализована в рамках программного комплекса для моделирования внутренней баллистики на многопроцессорных ЭВМ. В результате обработки экспериментальных данных по фильтрации азота в образцах энергетического материала показано, что коэффициент сопротивления для ЭМ из семиканальных зерен выше при той же пористости, чем в имеющихся экспериментальных данных для засыпок прессованных свинцовых шаров. Для ЭМ низкой пористости продемонстрировано совпадение с экспериментом результатов расчетов, в которых горение в имеющихся в непрессованных зернах ЭМ каналах не учитывается.

Научная значимость и практическая ценность исследования:

Для пористого энергетического материала, покрытого полимерной пленкой, построена модель, вычислительный метод и его программная реализация, позволяющая проводить исследование горения образцов в широком диапазоне объемных долей. Результаты расчетов, полученные в работе, согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Применение математического моделирования позволяет получить детали сложного для наблюдения и потенциально опасного быстропротекающего процесса горения ЭМ, а также масштабировать результаты лабораторных исследований к промышленным образцам.

Методы исследования и степень достоверности результатов:

Используемая математическая модель основана на многокомпонентной системе уравнений Р.И. Нигматулина. Для моделирования фазового перехода используется обобщение полуаналитической модели конвективного горе-

ния Б.С.Ермолаева. Горение пористых энергетических материалов описывается геометрическим законом горения, учитывающим постепенный охват зерна горением. При дискретизации модели применяется метод конечных объемов. Регуляризация модели выполняется на дискретном уровне путем расщепления по физическим процессам. Расчеты в общем случае проводятся на неструктурированных неравномерных сетках. Основной частью вычислительного метода является применение явной схемы Годунова-Колгана-Родионова, численные потоки для которого получаются на основе приближенного решения задачи Римана типа HLL. В качестве языка программирования применяются C++ и Fortran. При многопроцессорном расчете обмен информацией производится на основе технологии MPI. Достоверность результатов, полученных с использованием предложенной модели, обеспечивается тестированием отдельных элементов модели и модели в комплексе с использованием экспериментальных результатов.

Личный вклад автора:

Автором самостоятельно проведена разработка моделей, алгоритмов и программных модулей для реализации подходов к моделированию пористого ЭМ с пленочным покрытием в случае многокомпонентных фаз. Реализован алгоритм взаимодействия зерна ЭМ и пленки, учитывающий стадии воспламенения, пиролиза, охвата зерна горением и их длительность. Проведена регуляризация на дискретном уровне модели Р.И.Нигматулина описывающей динамику твердых недеформируемых частиц в газе. Автором построен и реализован в виде программного модуля численный метод для полученных в результате регуляризации систем. Все численные исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично автором в процессе научной деятельности. Материалы из совместных публикаций, использованные в работе, содержат оригинальные результаты автора.

Положения, выносимые на защиту:

- Физико-математическая модель горения высокоплотного энергетического материала, покрытого полимерной пленкой с учетом неравновесности, многокомпонентного состава, кинетики пиролиза пленки и прогрева.
- Регуляризация базовой неэволюционной модели динамики двухфазной дисперсной смеси газа с твердыми частицами.
- Численные методы решения регуляризованной системы уравнений течения двухфазной смеси газа с твердыми частицами годуновского типа на основе приближенных римановских решателей типа HLL.

- Алгоритмическая и программная реализация предложенной дискретной модели и методов в рамках программного комплекса для моделирования двухфазных течений газа с твердыми частицами на ЭВМ.
- Верификация и валидация разработанной вычислительной методики и ее программной реализации с использованием набора тестов.
- Результаты вычислительных экспериментов по исследованию процессов в экспериментальной установке с дожигательной секцией с использованием разработанной вычислительной методики. Сравнительный анализ экспериментальных и расчетных данных.

Апробация:

Результаты работы были представлены на российских и международных конференциях:

1. 10-я Научная конференция по горению и взрыву ИХФ им. Семенова, Москва, ИХФ РАН, Россия, 8-10 февраля, 2017.
2. 60-я научная конференция МФТИ, Москва, Долгопрудный, Жуковский, Россия, 20-26 ноября, 2017.
3. 11-я Научная конференция по горению и взрыву ИХФ им. Семенова, Москва, Москва, Россия, 7-9 февраля, 2018.
4. 50 years of the development of grid-characteristic method, Долгопрудный, Россия, 31 марта - 3 апреля, 2018.
5. The International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena (NEPCAP 2018), Sochi, Russia, October 1-5, 2018.
6. 61-й Всероссийская научная конференция МФТИ Москва - Долгопрудный - Жуковский, Россия, 19-25 ноября, 2018.
7. 8-я всероссийская научная конференция с международным участием «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред» им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского, ИПРИМ РАН, 18-19 декабря, 2018.
8. 12 ежегодная научная конференция отдела горения и взрыва ИХФ им. Н.Н. Семенова выступление РАН, Москва, ИХФ РАН, 6-8 февраля, 2019.
9. 12-й Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Уфа, Россия, 19-24 августа, 2019.

10. 13 ежегодная научная конференция отдела горения и взрыва ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, ИХФ РАН, 12-14 февраля, 2020.
11. Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2020», Москва, Россия, 10-27 ноября, 2020.
12. XV Всероссийский симпозиум по горению и взрыву Москва, 29 ноября — 4 декабря 2020.
13. Научная конференция по горению и взрыву, ФИЦ ХФ РАН, Россия, 10-12 февраля 2021.
14. Smart Computational Methods in Continuum Mechanics 2021, МФТИ, Россия, 28-29 октября 2021.
15. XXIX Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов 2022», МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия, 11-22 апреля, 2022.
16. 16-я Научная конференция по горению и взрыву, ФИЦ ХФ РАН, Россия, 8-10 февраля, 2023.

По теме диссертации опубликованы пять работ. Из них четыре опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией, две – в журналах, индексируемых в базе данных Scopus, одна – в журнале, индексируемом в базе данных Web of Science.

Объем и структура диссертации:

Полный объем диссертации составляет 90 страниц, включая 22 рисунка и 7 таблиц. Список литературы содержит 60 наименований.

Содержание работы:

Во **введении** представлен обзор литературы, посвященной моделированию динамики двухфазных сред, состоящих из газа с частицами в континуальном приближении. Показаны преимущества и недостатки используемых моделей. Рассмотрен процесс конвективного горения энергетических материалов, приведены примеры его практического применения. Дополнительно во введении представлены актуальность, научная новизна и практическая значимость работы, сформулированы цель и задачи, описаны методы исследования, приведены положения, выносимые на защиту и сведения о личном вкладе диссертанта.

Первая глава посвящена разработке модели конвективного горения пористого энергетического материала, состоящего из зерен, покрытых полимерной пленкой. В ней приводится описание используемых подходов и моделируемых явлений.

В **разделе 1.1** сформулированы основные положения модели. Рассматривается двухфазная многокомпонентная двухскоростная среда. Твердая фаза состоит из N компонент представляющих собой различные пороховые элементы и полимерную пленку. Газовая фаза содержит $N + 1$ компонент: из них один компонент - продукт пиролиза пленки, другой - воздух, а остальные - продукты горения соответствующего порохового элемента. Смесь рассматривается как гетерогенная. Каждый компонент j газовой фазы ($i = 1$) и несжимаемой к.фазы ($i = 2$) описывается объемной долей $\alpha_{i,j}$ средней по пористости плотностью $\rho_{i,j}$, α_i - объемная доля i -ой фазы. Давление p и температура T компонент газовой фазы одинакова. Система уравнений имеет вид законов сохранения с правой частью:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_m}{\partial x_m} = \mathbf{S} \quad (1)$$

и замыкается уравнением состояния в форме Дюпре. Если гранулы уплотняются так, что объемная доля становится больше α_2^* , возникает межгранулярное давление:

$$\pi(\alpha_2) = H[\alpha_2 - \alpha_2^*]B \left[\left(\frac{1 - \alpha_2^*}{1 - \alpha_2} \right)^k - 1 \right] \quad (2)$$

Используется одномерный и двумерный осесимметричный случай.

В **разделе 1.2** приводится описание модели межфазного силового взаимодействия. Используемый подход совпадает с аппроксимацией², которая предполагает использование коэффициентов сопротивления для одиночной сферы при высоких пористостях и Эргана при умеренных. Для энергетического материала низкой пористости используется зависимость для силы межфазного взаимодействия²:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{em} &= 1/8\alpha_{2,em}s_p C_d \rho_1 |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2| (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \\ Re_f &= \frac{6\rho_1 |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|}{\mu s_p}, \quad s_p = \sum_{j=1}^N \frac{\alpha_{2,j} s_j}{\alpha_2} \\ C_d &= A \frac{\alpha_2}{\alpha_1 Re_f} + B \end{aligned} \quad (3)$$

с модифицированными на основе экспериментальных данных по фильтрации азота в образцах коэффициентами A и B .

В разделе 1.3 приводится описание модели межфазного теплового взаимодействия. Энергия поступающая в компоненты дисперсной фазы с объемной долей ниже плотной упаковки рассчитывается на основе числа Нуссельта²:

$$Nu = \begin{cases} 2 + 0.106\alpha_1 Re Pr^{1/3} & \text{при } Re < 200, \\ 2.27 + 0.6(\alpha_1 Re)^{2/3} Pr^{1/3} & \text{при } Re > 200, \end{cases} \quad (4)$$

где $Re = d\rho_1|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|/\mu$, d - эквивалентный диаметр зерна, μ - вязкость газовой фазы. Теплообмен в высокоплотном энергетическом материале рассчитывается на основе канальной модели. Вместо пор ЭМ рассматриваются эквивалентные им по площади прямые цилиндрические каналы. Для числа Нуссельта используется аппроксимация вида:

$$Nu_q = 0.2(Re_q)^{2/3} Pr^{1/3} \quad (5)$$

где $Re_q = d_q\rho_1|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|/\mu$, $d_q = 2\alpha_1 d/3\alpha_2 F_A$ - эквивалентный диаметр цилиндрического канала, F_A - функция учитывающая площадь поверхности пятен контакта зерен.

Раздел 1.4 посвящен моделированию процесса воспламенения пленки. В модели предполагается, что начало пиролиза пленки соответствует достижению на ее поверхности заданной температуры воспламенения T_B . Для определения момента воспламенения в каждой точке пространства решается одномерная краевая задача для уравнения теплопроводности с ньютоновским теплообменом.

В разделе 1.5 приведен подход, используемый для описания процесса пиролиза пленки в порах. Модель пиролиза⁵ основана на предположении, что скорость регрессии пленки контролируется потоком тепла, поступающего на ее поверхность, и обратно пропорциональна тепловым затратам на пиролиз единицы массы полимера, включая суммарный эндотермический эффект реакций пиролиза Q_B и нагрев до температуры T_B :

$$\dot{m}_{film} = \frac{\alpha_{film}^q (T - T_B)}{Q_B + c_B (T_B - T_0)} \quad (6)$$

где $\alpha_{film}^q = \lambda_g Nu_q / d_q$ - коэффициент теплопередачи, c_B - удельная теплоемкость материала пленки, T_0 - начальная температура пленки.

В разделе 1.6 сформулирован полуэмпирический подход учитывающий изменение поверхности зерна, охваченной горением, после пиролиза пленки. Источник массы, связанный с выделением продукта горения энергетического материала, который покрывала пленка, модифицируется множителем G

⁵Ермолаев Б.С., Сулимов А.А., Беляев А.А., Романьков А.В., Посвянский В.С. Моделирование конвективного горения ингибированных энергетических материалов. // Химическая Физика, 2001, т. 20, № 1, с. 84–93.

линейно увеличивающимся с момента завершения пиролиза пленки в порах (на межфазной поверхности). Такой способ фактически означает снижение скорости послойного горения при текущей величине давления в течение промежутка роста G до 1.

Раздел 1.7 определяет подход к расчету газоприхода после полного охвата зерна горением, а также формулирует подходы к учету поверхности каналов имеющих в исходных зернах энергетического материала. Учет поверхности каналов производится с помощью характерного диаметра и набора коэффициентов формы. Используется стандартный геометрический закон горения и полученная к моменту полного охвата горением величина относительной толщины сгоревшего свода z .

Вторая глава описывает особенности базовой модели в случае однокомпонентной двухфазной среды без источников массы.

В **разделе 2.1** приводится базовая система определяющих уравнений в случае однокомпонентной двухфазной среды без источников массы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) = 0 \\ \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \mathbf{u}_2) = 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 + p) = \alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_1 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 + \alpha_2 \pi) = -\alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_2 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 E_1 \mathbf{u}_1 + p \mathbf{u}_1) = \alpha_2 \mathbf{u}_2 \nabla p + \nabla[p \alpha_2 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)] + \\ + \mathbf{u}_2 \mathbf{f}_1 + q_1 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 E_2 \mathbf{u}_2 + \alpha_2 \pi \mathbf{u}_2) = -\alpha_2 \mathbf{u}_2 \nabla p + \mathbf{u}_2 \mathbf{f}_2 + q_2 \end{array} \right. \quad (7)$$

и обсуждаются ее свойства: термодинамическая согласованность и потеря гиперболичности при некоторых параметрах течения.

Раздел 2.2 посвящен описанию предложенного подхода к регуляризации базовой модели на дискретном уровне. На первой стадии решается система уравнений (7) без правых частей и уравнения энергии для к.фазы, которая описывает движение смеси без учета межфазного взаимодействия и представляется в виде подсистемы газовой фазы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) = 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 + p) = 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 E_1 \mathbf{u}_1 + p \mathbf{u}_1) = 0 \end{array} \right. \quad (8)$$

и подсистемы уравнений для фазы частиц (к.фазы):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \mathbf{u}_2) = 0 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 + \alpha_2 \pi) = 0 \end{array} \right. \quad (9)$$

На второй стадии учитывается межфазное взаимодействие:

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} = 0 \\ \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} = 0 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}{\partial t} = \alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_1 \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}{\partial t} = -\alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_2 \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} = \alpha_2 \mathbf{u}_2 \nabla p + \nabla [p \alpha_2 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)] + \mathbf{u}_2 \mathbf{f}_1 + q_1 \end{cases} \quad (10)$$

В **разделе 2.3** сформулирован численный метод и рассмотрены его особенности. Пространственная дискретизация систем уравнений (8)-(10) основана на методе конечных объемов. Интегрирование по времени дискретной системы проводится с использованием явной схемы предиктор-корректор ГКР⁶:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_i^* &= \mathbf{q}_i^n - \frac{\Delta t}{2\omega_i} \sum_{\sigma} F_{\sigma} s_{\sigma} + 0.5 S_i \Delta t \\ \mathbf{q}_i^{n+1} &= \mathbf{q}_i^* - \frac{\Delta t}{\omega_i} \sum_{\sigma} F_{\sigma}^* s_{\sigma} + S_i \Delta t \end{aligned} \quad (11)$$

Второй порядок по пространству обеспечивается использованием интерполяционной схемы, основанной на MUSCL подходе с применением ограничителя производных Ван-Альбада⁷.

В **разделе 2.4** рассмотрена задача Римана для подсистемы уравнений движения твердой фазы (9) и построено ее точное решение. При этом описаны два класса решений, представленные волнами компактирования и раскомпактирования, и рассмотрены пять типов волновых конфигураций.

В **разделе 2.5** описан метод HLL для первой стадии регуляризованной модели. Для системы уравнений (8),(9) сформулирована задача Римана. Приближенное решение задачи Римана типа HLL строится при следующих предположениях. В результате распада начального разрыва образуется возмущенная область, ограниченная волнами s_L и s_R . Возмущенная область характеризуется постоянными консервативным вектором \mathbf{q}^* и вектором потока \mathbf{f}^* . Для подсистемы уравнений газовой фазы используется оценка скоростей Einfeldt⁸

$$\begin{aligned} s_{1,L} &= \min[0, \min(\bar{u}_1 - \bar{c}_1, u_{1,L} - c_{1,L})], \\ s_{1,R} &= \max[0, \max(\bar{u}_1 + \bar{c}_1, u_{1,R} + c_{1,R})], \end{aligned} \quad (12)$$

⁶Родионов А.В. Монотонная схема второго порядка аппроксимации для сквозного расчета неравновесных течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 1987. – Т. 27, № 4. – С. 585–593.

⁷G.D. van Albada, B. van Leer, W. Roberts, A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics // Astron. Astrophys, 108 (1982)

⁸Einfeldt B. et al. On Godunov-type methods near low densities // Journal of computational physics. – 1991. – Т. 92. – №. 2. – С. 273-295

где верхняя черта обозначает средние значения $\bar{u}_1 = 0.5(u_{1,L} + u_{1,R})$, $\bar{c}_1 = 0.5(c_{1,L} + c_{1,R})$. Для подсистемы уравнений конденсированной фазы (9) оценка проводится согласно:

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha}_2 &= \max(\alpha_{2,L}, \alpha_{2,R}), \\ \tilde{u}_2 &= \begin{cases} \frac{u_{2,L}\sqrt{\alpha_{2,L}} + u_{2,R}\sqrt{\alpha_{2,R}}}{\sqrt{\alpha_{2,L}} + \sqrt{\alpha_{2,R}}}, & \alpha_{2,L} > 0 \text{ или } \alpha_{2,R} > 0 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \\ \tilde{c}_2 &= c_2(\tilde{\alpha}_2), \\ s_{2,L} &= \min(\tilde{u}_2 - \tilde{c}_2, u_{2,L} - c_{2,L}, -\epsilon), \\ s_{2,R} &= \max(\tilde{u}_2 + \tilde{c}_2, u_{2,R} + c_{2,R}, \epsilon).\end{aligned}\tag{13}$$

Окончательно скорости ограничивающих волн определяются как экстремальные значения скоростей распространения возмущений по газу и дисперсной фазе $s_L = \min(s_{1,L}, s_{2,R})$, $s_R = \max(s_{1,R}, s_{2,L})$.

В разделе 2.6 описан метод HLL для второй стадии регуляризованной модели. Для системы (10) рассматриваются первые интегралы и уравнения-следствия:

$$\begin{aligned}\frac{\bar{\rho}_1 \bar{\rho}_2}{\bar{\rho}} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} &= -\alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_2, \\ \frac{\alpha_1}{\Gamma} \frac{\partial \ln(p)}{\partial t} &= -\nabla(\alpha_2 \mathbf{w}) + (\mathbf{w}, \mathbf{f}_1)/p + q_1/p,\end{aligned}\tag{14}$$

где $\bar{\rho}_1 = \rho_1 \alpha_1$, $\bar{\rho}_2 = \rho_2 \alpha_2$, $\bar{\rho} = \bar{\rho}_1 + \bar{\rho}_2$, $\mathbf{w} = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1$, Γ - коэффициент Мю-Грюнайзена (для идеального газа $\Gamma = \gamma - 1$). Предлагается двухволновое приближение, в котором скорости волн оцениваются как величины собственных значений системы уравнений (10) $\lambda = \mp \sqrt{\Gamma p \alpha_2 \bar{\rho} / \alpha_1 \bar{\rho}_1 \rho_2}$. Из соотношений Ренкина-Гюгонио получается выражение для численного потока в возмущенной области. Рассматривается случай отсутствия фазы частиц.

В разделе 2.7 описан подход применяемый для интегрирования источников, связанных с тепломассообменом и обменом импульса, имеющих в модели конвективного горения. Для каждой счетной ячейки число уравнений составляет $5N + 4$. Эти уравнения для каждой из N компонент выражают баланс массы и двух компонент импульса к.фазы, баланс массы соответствующего продукта горения - газовой компоненты и изменение относительной толщины сгоревшего свода. Остальные уравнения представляют собой баланс компонент импульса всей газовой фазы, закон сохранения массы для инертной компоненты - воздуха, а также уравнение изменения доли поверхности, охваченной горением, для одного энергетического материала, покрытого пленкой. Эта система решается с использованием методов Гира, реализованных в программе DLSODE.

Раздел 2.8 содержит описание особенностей реализации программного комплекса. При программной реализации вычислительного комплекса использовались языки программирования C++ и Fortran. Параллелизм программного комплекса основывается на методе декомпозиции расчетной области (PARMETIS) с использованием модели программирования на распределенной памяти (MPI). В расчетах используется многоблочные неструктурированные сетки, состоящие из четырехугольных элементов и записанные в формате CGNS. Приведены детали реализации и схема работы служебного модуля, управляющего расчетом, схема алгоритма вычислений на расчетном шаге.

Третья глава диссертации посвящена верификации и валидации реализованных моделей и численных алгоритмов на ряде задач.

В **разделе 3.1** рассматривается одномерная задача о разлете сжатого до критической объемной доли слоя частиц в вакуум. В этой задаче налево от разрыва распространяется волна раскомпактирования. Расположенная правее граница плотной упаковки является лагранжевой границей, отделяющей область частиц от вакуума. В расчете по приближенному методу HLL на границе конденсированной фазы и области без частиц скорость конденсированной фазы описывается менее точно, чем в схеме Годунова.

В **разделе 3.2** рассматривается аналог теста Шу-Ошера в дисперсной фазе. Волна компактирования распространяется по засыпке частиц (без газа) с синусоидальным распределением объемной доли. По мере удаления от фронта распространяющейся волны компактирования убывающие участки профиля решений (волны сжатия) становятся круче, что, в конечном счете, приводит к опрокидыванию фронтов (явление градиентной катастрофы) и формированию последовательности двигающихся друг за другом волн компактирования (волновой поезд). Результаты по схемам Годунова и HLL показывают слабо отличающиеся решения.

В **разделе 3.3** рассматривается разгрузка слоя частиц толщиной 0.01 м, имеющего объемную долю выше критической и расположенного у жесткой стенки, в пространство, заполненное частицами с докритической объемной долей. В результате распада разрыва и взаимодействия со стенкой в пристеночной области формируется распределение параметров среды, которое характеризуется постоянным по пространству и убывающим по времени значением объемной доли и линейным профилем скорости частиц. Константы характеризующие полученное частное аналитическое решение вычисляются на основе расчетных значений объемной доли частиц в двух последовательных моментах времени. Полученное аналитическое решение согласуется с численным и в последующие моменты времени.

В **разделе 3.4** рассматривается одномерное движение засыпки частиц с докритической объемной долей в газе. Давление газа в области постоян-

но, скорость газа и частиц одинаковы. Объемная доля частиц и плотность газа претерпевают разрыв. Тест демонстрирует способность численного метода сохранять движение смеси частиц и газа с постоянной скоростью (the property of wellballancing в английской литературе) без образования нефизических возмущений.

В разделе 3.5 представлено сравнение численного решения задачи о распаде разрыва в газе с частицами с референсным точным решением, полученным в предположении неподвижности частиц. В расчете рассматривается несколько твердотельных плотностей частиц. При высокой плотности частиц они фактически остаются на месте, поэтому полученное численное решение должно совпадать с референсным.

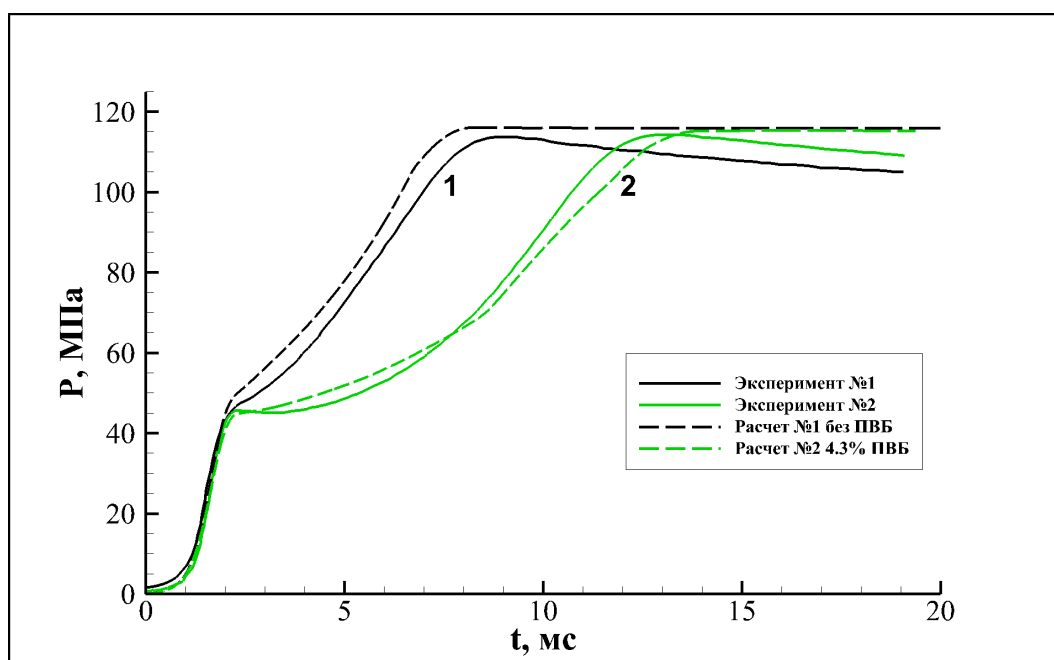


Рис. 1: Экспериментальные (сплошные линии) и расчетные (пунктирные линии) диаграммы давления в замкнутом объеме при горении образцов насыпной плотности из пироксилинового пороха 5/7 без ПВБ (1) и из пороха 5/7 с 4.3% ПВБ (2).

В разделе 3.6 проводится верификация механизма горения энергетического материала с пленочным покрытием и без него в условиях постоянного объема цилиндрической формы. Рассматриваются образцы насыпной плотности, приводятся параметры установки и используемых энергетических материалов. Экспериментальные зависимости давления внутри объема от времени сравниваются с расчетными данными на рис. 1. Наличие полимерной пленки приводит к отчетливым изменениям диаграммы давления: максимальный темп роста давления заметно снижается, горение заряда начинается с задержкой после сгорания воспламенителя (при отсутствии пленки заряд начинает гореть еще до завершения горения воспламенителя). Результаты расчетов со-

гласуются с экспериментальными данными по форме и максимальному темпу роста давления как для опыта без ПВБ, так и для опыта с пленкой полимера.

В **четвертой главе** приведены результаты численного исследования горения блоков энергетического материала (ЭМ) высокой плотности (ВЗКГ), изготовленных из зерен, покрытых пленкой поливинилбутирала (ПВБ), в установке, состоящей из двух соосных цилиндрических секций: оболочки с исследуемым ЭМ и дожигательной секции с отверстием для сброса давления.

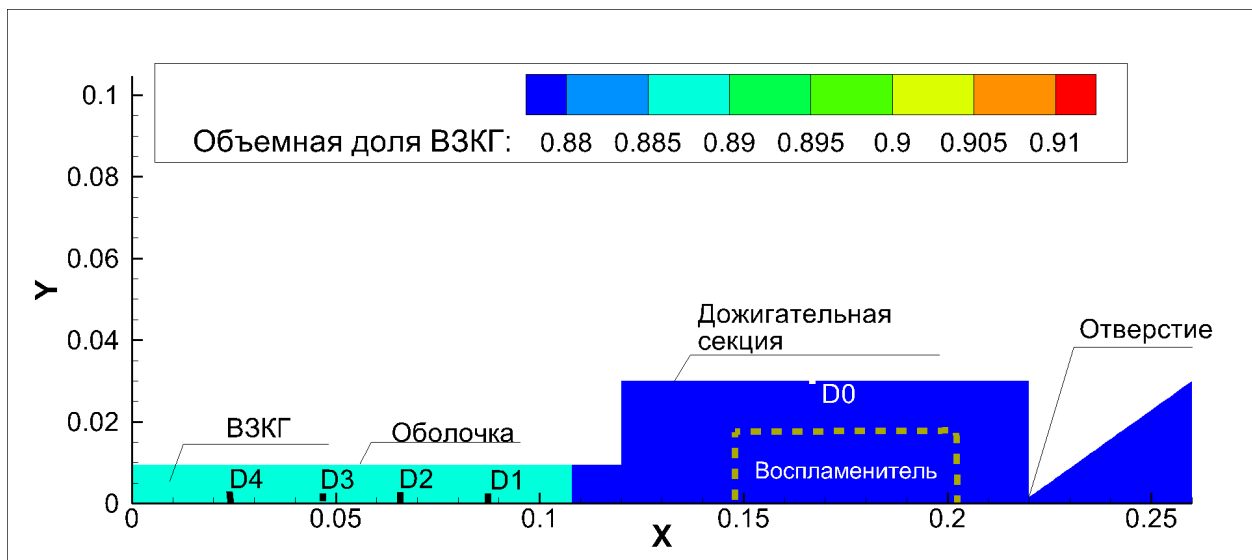


Рис. 2: Схема экспериментальной установки.

В **разделе 4.1** приведена постановка задачи, включающая геометрические размеры секций, общий вид установки, параметры и расположение использовавшихся энергетических материалов. Экспериментальные данные представляют собой записи показаний четырех датчиков давления D1-D4, расположенных вдоль исследуемого ЭМ и одного датчика давления D0, расположенного в дожигательной секции. Расчетная область схематически представлена на рис. 2. Зерна прессовались порционно непосредственно в канал оболочки. В расчетах рассматриваются образцы ЭМ № 1, 2, 3 с пористостью соответственно 0.2293, 0.1147, 0.0838. Воспламенение образцов производилось под действием газов, образующихся при сгорании воспламенителя, расположенного в дожигательной секции, которые поступали в канал цилиндрической оболочки, а также выходили во внешнее пространство через отверстие.

В **разделе 4.2** приведены результаты моделирования воспламенения и горения образцов № 1-3 и используемые параметры модели. Для каждого из экспериментов представлены две расчетные диаграммы давления, соответствующие предположению о том, что поверхность каналов не участвует или участвует в горении. В первом случае форма зерен ЭМ считается сферической, во втором – цилиндрической с каналами. Для образца №1 (высокой

пористости) в результате моделирования получена диаграмма давления, соответствующая постепенному проникновению газов в образец на стадии горения воспламенителя. Продемонстрировано, что расчетный темп роста давления в интервале 7-13мс согласуется с экспериментальными данными при учете горения по поверхности каналов.

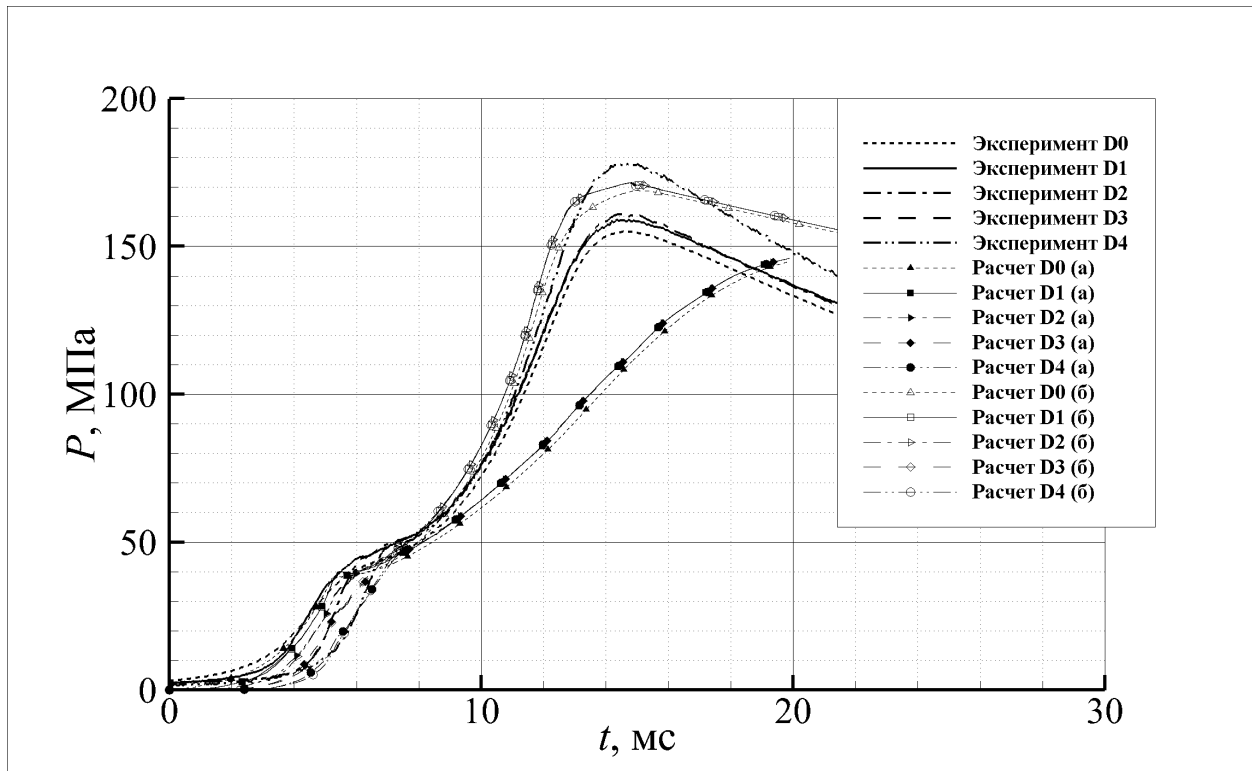


Рис. 3: Экспериментальные (линии без символов) и расчетные (линии с символами) диаграммы давления в 4 положениях по длине образца и в дожигательной секции в опыте по конвективному горению блочного ЭМ № 1. Форма зерен: а) сферическая, б) цилиндрическая с каналами 5/7.

Для эксперимента №2 (средней из рассматриваемых пористостей) проведены аналогичные расчеты, а также проведено варьирование параметров модели, влияющих на длительность стадии пиролиза пленки и стадии охвата зерна горением. Отмечены временные границы моделируемых процессов и характерные им давления, представлены пространственные распределения параметров в исследуемом образце (одномерном продольном срезе). Получено согласие результатов расчета и эксперимента.

Для эксперимента №3 (низкой пористости) получено завышенное время пиролиза пленки в порах при единых для всех расчетов параметрах модели. Продемонстрировано согласие результатов расчета и эксперимента на стадии охвата зерна горением в предположении отсутствия горения по поверхности каналов (случай сферической формы зерен).

В заключении приведены основные результаты работы.

Основные результаты:

- Разработана численная модель для описания процессов воспламенения и горения энергетического материала, покрытого полимерной пленкой в двухфазном эйлеровом приближении. Предложенная модель ВЗКГ учитывает многокомпонентный состав газовой и дисперсной фазы: при горении компонента дисперсной фазы выделяется соответствующий компонент газовой фазы - продукт горения. Модель пиролиза пленки ингибитора на поверхности порохового зерна учитывает стадии нагрева пленки, пиролиза заданной части пленки, покрывающей поверхность пор и пиролиза пленки вне пор. В предложенной модели пиролиз в порах описывается на основе расчета теплового потока между пленкой и газовой фазой. Охват зерна горением происходит постепенно и моделируется введением эмпирической зависимости от времени.
- В работе предложен метод регуляризации математической модели течения двухфазной смеси газа с твердыми частицами Р.И. Нигматулина. Метод регуляризации основывается на расщеплении исходной системы на две подсистемы, описывающие соответственно динамику фаз и межфазное взаимодействие. Для каждой из полученных систем построен метод Годуновского типа на основе приближенного HLL решения задачи Римана. В работе построена модификация метода Годунова на основе точного решения задачи Римана для континуальной модели движения ансамбля твердых частиц.
- Разработанная модель была реализована в виде вычислительных алгоритмов, которые были интегрированы в программный комплекс для моделирования двухфазных течений газа с твердыми частицами на многопроцессорных ЭВМ.
- Проведена верификация предложенного численного метода на серии задач, допускающих точные решения или их аналитические оценки. Результаты тестовых расчетов показали хорошее совпадение с точными аналитическими решениями по количественным волновым характеристикам (амплитуде, скорости распространения волн).
- Проведены расчеты горения образцов трех различных плотностей из семиканальных зерен, ингибированных пленкой ПВБ, в установке с дожигательной секцией. На основе проведенных вычислительных экспериментов удалось определить расчетные времена и давления границ характерных стадий пиролиза. Проведено варьирование длительности стадий пиролиза в порах и вне пор.

Публикации автора по теме диссертации:

Публикации в изданиях рекомендованных ВАК

1. I.S. Menshov, M.Y. Nemtsev, I.V. Semenov. Numerical Modeling of Wave Processes Accompanying Combustion of Inhomogeneously Distributed Composite Propellant // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2019. – Т. 59. – №. 9. – С. 1528-1541.
2. И.В. Семенов, И.С. Меньшов, М.Ю. Немцев. Математическое моделирование осесимметричных внутрибаллистических процессов // Препринты Института прикладной математики им. МВ Келдыша РАН. – 2017. – №. 143. – С. 143-20.
3. М.Ю. Немцев, И.С. Меньшов, И.В. Семенов. Численное моделирование динамических процессов в среде мелкодисперсных твердых частиц // Математическое моделирование. – 2022. – Т. 34. – №. 8. – С. 73-96.
4. М.Ю. Немцев Численное моделирование динамики двухфазной смеси газа и твердых дисперсных частиц // Математическое моделирование. – 2023. – Т. 35. – №. 7. – С. 97-117.

Публикации в прочих изданиях

1. М.Ю. Немцев, И.В. Семенов, Б.С. Ермолаев. Моделирование фильтрации и конвективного горения в блочных зарядах зерен порошка, ингибированных поливинилбутиралем в постоянном объеме // Nonequilibrium processes. Vol. 2. Сборник трудов конференции 8th International Symposium On Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion, And Atmospheric Phenomena. 2019. С. 352-363.

Немцев Максим Юрьевич

Численное моделирование процессов горения пористых энергетических материалов в широком диапазоне объемной доли

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать __. __. _____. Заказ № _____

Формат 60x90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

ИПМ им.М.В.Келдыша РАН. 125047, Москва, Миусская пл., 4