

Федеральное государственное учреждение
«Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша
Российской академии наук»

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

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д. ф.-м. н., г.н.с
Меньшов Игорь Станиславович

Москва 2023

Оглавление

Введение.....	4
Глава 1 Модель горения пористого ЭМ с покрытием.....	20
1.1 Общие положения и моделируемы процессы.....	20
1.2 Межфазное силовое взаимодействие.....	25
1.3 Межфазное тепловое взаимодействие	28
1.4 Модель воспламенения пленки	30
1.5 Моделирование пиролиза пленки	30
1.6 Моделирование изменения поверхности зерна при пиролизе пленки ...	31
1.7 Горение энергетического материала.....	32
Глава 2 Численный метод.....	34
2.1 Базовая система уравнений.....	34
2.2 Регуляризация модели	35
2.3 Численная схема.....	39
2.4 Аппроксимация численного потока в к.фазе	41
2.5 Метод HLL для первой стадии	48
2.6 Поточковая форма метода HLL для второй стадии	50
2.7 Интегрирование локальных источников	53
2.8 Особенности программной реализации.....	54
Глава 3 Тестирование расчетной методики.....	59
3.1 Разлет сжатого слоя частиц в вакуум	59
3.2 Распространение волны компактирования по неоднородно распределенным частицам (волновой поезд).....	61
3.3 Разлет пристеночного слоя частиц.....	62
3.4 Конвективный перенос плоского слоя частиц в газе	66
3.5 Задача о распаде произвольного разрыва в газе с частицами	67
3.6 Горение в замкнутом объеме	69
Глава 4 Численное моделирование горения ВЗКГ	72
4.1 Постановка задачи	72

4.2 Результаты расчетов	74
Заключение	83
Публикации автора по теме диссертации	86
Список литературы	87

Введение

Актуальность: 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 [1,6], диспергирования пылевых слоев за ударными волнами [7], распространения детонации в дисперсных системах [8] 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 моделирование 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 [1].

Развитие артиллерийских систем связано с повышением скорости метаемого 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.

Степень научной разработанности темы: Оформление классической математической модели внутрибаллистического процесса произошло на рубеже XIX и XX века. Фундаментом данной модели стали основополагающие работы Резаля[9], Сарро[10], Вьеля[11], Шарбонье[12]. Для решения системы уравнений этой модели применялся аналитический метод, разработанный Н.Ф.Дроздовым [13] и получивший дальнейшее развитие, в частности, в

работах М.Е.Серебрякова[14]. Эта модель представляет собой систему из трех обыкновенных дифференциальных уравнений для изменения во времени относительной толщины свода горения пороха, скорости метаемого тела и его пути. Понятие относительной толщины свода горения происходит из предположения о геометрическом горении пороха по всей поверхности параллельными слоями. При этом текущее значение горячей поверхности и массы сгоревшего пороха определяется геометрией порохового элемента при его заданной плотности. Скорость послойного горения зависит от давления и является величиной, определяемой в результате экспериментов по горению пороха в замкнутом объеме. В начальный момент времени относительная толщина свода горения равна нулю. Уравнение для изменения скорости метаемого тела представляет собой второй закон Ньютона для метаемого тела, движение которого начинается только после достижения заданной величины давления - давления форсирования. Изменение пройденного метаемым телом пути происходит при заданном калибре со скоростью движения метаемого тела и влияет на давление в объеме за метаемым телом. В таком виде модель представляет собой нульмерную постановку, в которой заснарядное пространство характеризуется одним значением давления. Модель также не учитывает конструкцию заряда и заснарядного пространства. Широкая распространенность модели связана с быстротой получаемого результата моделирования.

Развитием классической термодинамической модели внутрибаллистического процесса стала газодинамическая модель выстрела. Эта модель основывается на подходе двух взаимопроникающих континуумов. В этой модели каждая фаза описывается своим континуумом, характеризующимся своими полями плотности, скорости, давления и прочих параметров течения. Система определяющих уравнений выводится на основе законов сохранения массы, импульса и энергии для каждой фазы и определенной модели силового и теплового межфазного взаимодействия.

Для случая, когда обе фазы являются сжимаемыми средами с шаровым

тензором напряжения и соответствующими термодинамическими уравнениями состояния, континуальная модель двухфазной дисперсной смеси была выведена достаточно строго из фундаментальных принципов термодинамики в работе [8]. Она известна в современной литературе как неравновесная модель Байера-Нунзиато (далее модель БН).

Альтернативные континуальные модели течения двухфазных дисперсных смесей в режимах, соответствующих небольшим значениям объемной доли дисперсной компоненты, рассматривались также в работах [15-17], а одной из первых моделей была модель Марбла [18]. Она описывает только класс разреженных течений, когда объемной долей частиц можно пренебречь. Эта модель сводится фактически к уравнениям газовой динамики с переменным (зависящим от массовой концентрации частиц) показателем адиабаты в уравнении состояния.

Континуальные модели, учитывающие объемную долю частиц и, в принципе, пригодные для широкого диапазона течений, предложены в работах [16,19,20]. Эти модели основаны на фундаментальных законах сохранения массы, импульса и энергии и учитывают наряду с вязким взаимодействием фаз также архимедову силу за счет градиента давления в газе. Уравнение сохранения массы в такой модели имеет вид закона сохранения числа частиц или, что эквивалентно, объемной доли части.

Эти модели хотя и широко используются для практических задач, имеют два существенных недостатка: не являются строго гиперболическими и имеют неконсервативный вид. В этом случае собственные числа могут быть комплексными. Это приводит к плохой обусловленности математической задачи, неустойчивости численного решения и введению дополнительных искусственных алгоритмов стабилизации, которые, как правило, не всегда решают проблему.

Модель БН не имеет указанного недостатка (вырождения гиперболичности). Каждый из континуумов описывается своей системой уравнений Эйлера – набором законов сохранения массы, импульса и энергии.

Полученная система уравнений замыкается уравнением на объемную долю, которое имеет вид уравнения переноса с некоторой межфазной скоростью. Собственные числа системы уравнений БН являются действительными и, следовательно, она является гиперболической. Недостатком такого подхода является то, что дисперсную фазу приходится рассматривать не как ансамбль абсолютно твердых недеформируемых частиц, а как некоторую фиктивную сжимаемую среду со своим уравнением состояния. Как правило, это уравнение состояния не является реальным уравнением, описывающим свойства материала частиц, а подбирается искусственным образом [21]. Кроме того, неконсервативное уравнение переноса для объемной доли не гарантирует сохранение числа частиц, что важно для описания дисперсных смесей.

Следует отметить, что модель БН изначально была предложена для описания физико-химических процессов плотноупакованной гранулированной среды при высоких давлениях, в частности, при расчете перехода дефлаграции в детонацию в конденсированных высокоэнергетических материалах. Для таких процессов ее применение оправдано, поскольку частицы находятся в плотном контакте друг с другом и могут моделироваться не как дисперсная среда, а как некоторый пористый материал. В частности, процесс диспергирования частиц и переход их в разреженное состояние с малой объемной долей моделью БН не описывается. Модель БН в предельном случае малой исчезающей объемной доли не переходит в модель Марбла.

Второй особенностью системы уравнений БН является поведение при слабо меняющейся плотности дисперсной фазы. В этом случае закон сохранения массы приводит к уравнению баланса числа частиц, которое имеет не дивергентную форму и таким образом противоречит закону сохранения числа частиц. В модели Р.И.Нигматулина закон сохранения числа частиц имеет дивергентную форму. Таким образом, в плане физики модель Нигматулина более адекватно описывает широкодиапазонные динамические процессы в двухфазной смеси газа и твердых мелких частиц, чем модель БН.

Вместе с тем последняя в математическом плане является корректной для эволюционных задач.

Построение модели и анализ свойств термодинамической согласованности и гиперболичности для случаев малой объемной доли дисперсной фазы (разреженной смеси) и относительно большой, соответствующей плотной упаковке частиц дисперсной фазы, приводятся в работах [22–24]. В этих работах существенно используется предположение о сжимаемости обеих фаз.

Относительно мало работ имеется по моделям для случая несжимаемой твердой дисперсной фазы. В первую очередь здесь надо отметить работы А.Н. Крайко с коллегами. Построение двухфазной двухскоростной континуальной модели в предположении отсутствия столкновений частиц рассматривается в работах [16,19]. Возникающие при этом вопросы корректности задачи Коши изучаются в работах [25,26]. Исследованию запыленного газа, а также двухфазного пограничного слоя посвящены работы [27,28].

Исследование физических аспектов горения [29] связано с появлением новых энергетических материалов и возникновением сопутствующих их внедрению аварий. Наиболее разрушительные последствия возникают при переходе послойного горения в детонацию. Этот переход в общем случае происходит в четыре стадии. На стадии послойного горения фронт горения распространяется за счет теплопроводности. Было установлено, что после срыва послойного горения происходит процесс, получивший название конвективное горение. Конвективное горение является результатом проникновения продуктов горения вглубь слоя энергетического материала с последующим его воспламенением. В результате этого процесса горение приобретает характер самоускоряющегося процесса, сопровождающегося повышением давлением и площади горящей поверхности. После ускорения пламени в режиме конвективного горения в зависимости от условий протекания процесса может происходить переход к так называемой низкоскоростной детонации. Наконец, формирование ударной волны

приводит к переходу в нормальную детонацию. Опыты по изучению перехода горения в детонацию [30,31] в замкнутых оболочках из материалов низкой прочности или в оболочках с отверстием, через которое продукты горения вытекали во внешнее пространство показали, что существуют условия, в которых ускоренное развитие переходного процесса имеет место до определенного предела, после которого волна конвективного горения стабилизируется в виду равенства газопритока за счет горения и стока при разрузке. Наличие оттока резко снижает темп роста давления, и, следовательно, скорость газов, втекающих в поры, на ключевой начальной фазе конвективного горения, делая развитие горения более мягким и медленным [32,33].

Необходимость ограничения максимального давления во внутрибаллистическом процессе привела к идее покрытия энергетического материала полимерной пленкой, замедляющей горение и играющей таким образом роль ингибитора. Образцы, изготовленные по данной технологии, получили в России название ВЗКГ (высокоплотный заряд конвективного горения). В США, Франции, Великобритании и Китае похожий заряд получил название “consolidated propellant” (уплотненный пороховой заряд) [34,35,36]. Исследования [32] показали, что прирост дульной скорости вызван тем, что ВЗКГ горит с высокой прогрессивностью, превышающей прогрессивность горения зерен пороха, образующих блоки. Процесс конвективного горения экспериментально и теоретически изучался в работах Куо[37]. В частности, в работе [38] приведена модель конвективного горения в газодинамической постановке в случае подвижных порохов. Моделирование реальных экспериментальных устройств с использованием одномерной полуаналитической модели конвективного горения приведено в [39]. Вариант модели с детальным описанием возникающих в конденсированной фазе напряжений представлен в работе [6].

В случае ВЗКГ, высокая прогрессивность образцов определяется двумя факторами: (1) наличием пленки полимера, которой покрывают наружную

поверхность пороховых зерен перед прессованием блока, (2) высокой плотностью энергетического материала, благодаря которой большая часть наружной поверхности зерен оказывается закрытой пятнами контакта с соседними зёрнами. Для воспламенения пороха необходимо удалить пленку полимера с его поверхности. В результате скорость, с которой фронт пламени распространяется на весь объем блока резко (на порядок величины и более) снижается по сравнению с традиционными образцами насыпной плотности. Кроме того, в ходе этого процесса воспламеняется лишь малая часть наружной поверхности зерна, которая открыта действию горячих газов, фильтрующихся по порам. Полный охват наружной поверхности порохового зерна горением происходит после того, как завершится процесс диспергирования блока на отдельные горящие зёрна. Действие этих факторов приводит к тому, что воспламенение блока занимает значительное время, по сравнению с традиционным образцом из обычных пороховых зерен насыпной плотности. В случае ВЗКГ поверхность блока, охваченная горением, монотонно растет, обеспечивая высокую прогрессивность.

Применение модели взаимопроникающих континуумов в случае неравновесной смеси газовой фазы и дисперсной среды с твердыми несжимаемыми недеформируемыми частицами рассматривалось в работах [6,16]. Для описания режимов с плотной упаковкой частиц дисперсной фазы в этих работах вводится дополнительный тензор межгранулярного взаимодействия. Его шаровая часть отвечает за межгранулярное давление, которое возникает только при значениях объемной доли больше некоторого критического значения. Оно соответствует значению плотной упаковки частиц. При меньших значениях объемной доли межгранулярное давление вырождается.

Система уравнений движения двухфазной дисперсной используется в работах [40, 41] для описания процессов распространения и затухания ударных волн в среде с плотно упакованными твердыми частицами. В этих работах, а также в [42], обсуждаются некоторые вопросы, связанные с

особенностями численного решения неконсервативных систем уравнений двухфазной гидродинамики. В работе [43] предлагается метод приближенного решения задачи Римана для произвольной неконсервативной системы гиперболических уравнений, который учитывает полный набор собственных чисел матрицы Якоби и соответствующую этому набору полную волновую конфигурацию задачи.

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), 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 гоуновского 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.

Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы: 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 горения 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.

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 гоудуновского 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.

Публикации. По теме диссертации опубликованы пять работ [1,2,3,4,5]. Из них четыре опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией, две [4,5] – в журналах, индексируемых в базе данных Scopus, одна [1] – в журнале, индексируемом в базе данных Web of Science.

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.

Объем и структура диссертации: Диссертационная работа посвящена построению математической модели пористого энергетического материала, покрытого полимерной пленкой, в эйлеровом приближении, численного метода и его программной реализации и состоит из четырех глав.

Первая глава посвящена построению математической модели конвективного горения энергетического материала высокой плотности, покрытого пленочным ингибитором в приближении взаимопроникающих континуумов. В ней приведено описание параметров модели и моделируемых явлений. Для моделирования межфазного взаимодействия рассмотрены эмпирические аппроксимации коэффициентов сопротивления и теплообмена в двухфазной системе в условиях, соответствующих экспериментальным. Процесс горения описывается полуэмпирической моделью и разделяется на последовательность стадий. Описание каждой стадии опирается на текущую величину горячей поверхности порохового элемента. Для каждой стадии указаны условия ее начала и завершения. Описание газопритока после охвата зерна горением производится на основе геометрического закона горения порохов с учетом постепенного охвата зерна горением.

Во второй главе приведено описание численного метода интегрирования системы уравнений, составляющих математическую модель горения ВЗКГ. При этом рассматриваются свойства модели Р.И. Нигматулина [15] для однокомпонентной двухфазной среды с абсолютно жесткими, недеформируемыми и несжимаемыми частицами. В работе предложен метод регуляризации математической модели, который основывается на расщеплении исходной системы на две подсистемы, описывающие соответственно динамику фаз и межфазное взаимодействие. Для каждой из полученных систем, являющихся гиперболическими и имеющими консервативный вид, построен метод Годуновского типа на основе приближенного HLL(Harten-Lax-van Leer) [44] решения задачи Римана. Для твердой фазы приводится точное решение задачи Римана и двухволновое приближенное решение HLL.

Третья глава посвящена верификации и валидации численного метода решения базовой системы уравнений движения двухфазной смеси и чистой конденсированной фазы, а также модели процесса взаимодействия зерна и пленки при горении. Рассматриваются одномерные задачи, являющиеся аналогами известных газодинамических тестов. Численные решения, полученные с помощью метода Годунова с использованием приближенного решения задачи Римана типа HLL, сравниваются с точными аналитическими решениями, расчетами с использованием точного решения задачи Римана в твердой фазе и экспериментальными данными. Полученные численные решения демонстрируют особенности системы в процессах с формированием волновых структур компактирования и раскомпактирования твердой фазы при ударно-волновых взаимодействиях.

В четвертой главе приведены результаты численного моделирования горения ВЗКГ с пленочным покрытием различных пористостей, соответствующих экспериментальным постановкам. Раздел содержит описание и параметры экспериментальной установки, используемого энергетического материала и ингибитора, составляющих образец. Для каждой

плотности заряжения проведены расчеты в предположении открытости и закрытости каналов пороховых зерен. Для образца, имеющего среднюю среди рассмотренных плотность заряжения приведены результаты численных расчетов при варьировании параметров модели, определяющих длительность стадии пиролиза пленочного ингибитора на открытой поверхности зерен и в процессе охвата зерна горением. Результаты расчетов сравниваются с полученными в эксперименте записями показаний датчиков давления, установленных в экспериментальной установке.

Полный объем диссертации составляет 90 страниц, включая 22 рисунка и 7 таблиц. Список литературы содержит 63 наименования

Поддержка работы. Исследования проводились при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-31-90027 («Аспиранты»).

Глава 1 Модель горения пористого ЭМ с покрытием

1.1 Общие положения и моделируемые процессы

Горение ЭМ будем рассматривать в приближении взаимопроникающих континуумов. Каждый из континуумов представляет собой многокомпонентную фазу. Для определенности будем считать, что первая фаза является газовой, а вторая – твердой. Твердая фаза, которую далее также будем называть конденсированной фазой (к.фазой) состоит из N компонентов. Этими компонентами являются исследуемый энергетический материал (ЭМ), покрывающая его пленка и ЭМ, составляющие воспламенитель. Воздух, который в начальном состоянии заполняет поры ЭМ и окружающее пространство, а также продукты, выделяющиеся в ходе последующего горения соответствующего компонента к.фазы и пиролиза покрытия, представляющего собой полимерную пленку, образуют газовую фазу. Таким образом газовая фаза состоит из $N + 1$ компонентов.

Смесь рассматривается как гетерогенная, каждая компонента которой занимает только определенную часть объема. Каждый компонент газовой фазы описывается объемной долей $\alpha_{1,j}$ и истинной плотностью $\rho_{1,j}^0$. Средняя плотность компоненты определяется как $\bar{\rho}_{1,j} = \alpha_{1,j} \rho_{1,j}^0$. Объемная доля газовой фазы (пористость): $\alpha_1 = \alpha_{1,1} + \dots + \alpha_{1,N+1}$. Средняя плотность непрерывной фазы определяется выражением $\bar{\rho}_1 = \bar{\rho}_{1,1} + \dots + \bar{\rho}_{1,N}$. Истинная средняя плотность газовой фазы ρ_1 определяется посредством соотношения $\bar{\rho}_1 = \alpha_1 \rho_1$. Вводя среднюю по пористости плотность $\rho_{1,j}$ через соотношение $\bar{\rho}_{1,j} = \alpha_{1,j} \rho_{1,j}$ для истинной средней плотности непрерывной фазы получим соотношение: $\rho_1 = \rho_{1,1} + \dots + \rho_{1,N+1}$.

Каждый компонент твердой фазы описывается объемной долей $\alpha_{2,j}$ и средней по пористости плотностью $\rho_{2,j}$. Объемная доля к.фазы: $\alpha_2 = \alpha_{2,1} + \dots + \alpha_{2,N}$.

Предполагается, что различие в скорости между компонентами фазы мало, поэтому им можно пренебречь и описывать течение газовой и твердой фазы векторами скорости \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 соответственно (т.е. различные фазы имеют различные скорости). Это допущение фактически означает, что мы пренебрегаем эффектом проскальзывания на контактных границах компонент фазы, но не на межфазной границе.

Также будем предполагать, что давление и температура компонент газовой фазы одинаковые. Другими словами, мы не рассматриваем здесь случаи, когда давление или температура меняются скачком при переходе через контактную границу, разделяющую компоненты непрерывной фазы. Введем p и T_1 для обозначения давления и температуры, соответственно.

Каждый компонент газовой фазы считается в плане термодинамики двухпараметрической средой, свойства которой определяются соответствующими уравнениями состояния:

$$e_{1,j} = e_{1,j}(p, \rho_{1,j}^0) \quad (2.1.1)$$

$$p = p_{1,j}(T_1, \rho_{1,j}^0) \quad (2.1.2)$$

где $e_{1,j}$ - удельная внутренняя энергия, T_1 - температура. В данной работе используется уравнение состояния в форме Дюпре [1], с соответствующими параметрами γ_j (показатель адиабаты) и b_j (коволум):

$$e_{1,j} = \frac{p(1 - b_j \rho_{1,j}^0)}{(\gamma_j - 1) \rho_{1,j}^0} \quad p(1 - b_j \rho_{1,j}^0) = \frac{R}{M_j} \rho_{1,j}^0 T_1 \quad c_j^2 = \frac{\gamma_j p}{\rho_{1,j}^0 (1 - b_j \rho_{1,j}^0)} \quad (2.1.3)$$

где c_j - скорость звука, R - универсальная постоянная, M_j - молекулярная масса. При этом единое уравнение состояния для газовой фазы в этом случае в точности совпадает по форме с уравнением Дюпре для средней плотности

непрерывной фазы ρ_l , давления p и температуры T_l с приведенными (эффективными) параметрами показателя адиабаты γ , коволюма b и молекулярной массы M [1]:

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^{N+1} \frac{1}{M_j}, \quad b = \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^{N+1} \rho_{1,j} b_j, \quad \gamma = 1 + \frac{\sum_{j=1}^{N+1} \frac{\rho_{1,j}}{M_j}}{\sum_{j=1}^{N+1} \frac{\rho_{1,j}}{M_j (\gamma_j - 1)}} \quad (2.1.4)$$

Система определяющих уравнений движения двухфазной смеси имеет вид законов сохранения с правой частью, включает $N+1$ уравнение неразрывности для газовой фазы, N уравнений неразрывности для к.фазы, два уравнения баланса импульса и два закона сохранения энергии и может быть представлена в виде:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}_m}{\partial x_m} = \vec{S}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (2.1.5)$$

где

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} \alpha_{1,1} \rho_{1,1} \\ \vdots \\ \alpha_{1,N+1} \rho_{1,N+1} \\ \alpha_{2,1} \rho_{2,1} \\ \vdots \\ \alpha_{2,N} \rho_{2,N} \\ \alpha_1 \rho_1 u_{1,k} \\ \alpha_2 \rho_2 u_{2,k} \\ \alpha_1 \rho_1 E_1 \\ \alpha_2 \rho_2 E_2 \end{pmatrix}, \quad (2.1.6)$$

$$\vec{F}_m = \begin{pmatrix} \alpha_{1,1}\rho_{1,1}u_{1,m} \\ \vdots \\ \alpha_{1,N+1}\rho_{1,N+1}u_{1,m} \\ \alpha_{2,1}\rho_{2,1}u_{2,m} \\ \vdots \\ \alpha_{2,N}\rho_{2,N}u_{2,m} \\ \alpha_1\rho_1u_{1,k}u_{1,m} + p\delta_{k,m} \\ \alpha_2\rho_2u_{2,k}u_{2,m} + \alpha_2\pi\delta_{k,m} \\ \alpha_1\rho_1E_1u_{1,m} + pu_{1,m} \\ \alpha_2\rho_2E_2u_{2,m} + \alpha_2\pi u_{2,m} \end{pmatrix} \quad (2.1.7)$$

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} \dot{m}_1 \\ \vdots \\ 0 \\ -\dot{m}_1 \\ \vdots \\ -\dot{m}_N \\ \alpha_2\nabla p + \dot{m}u_{2,k} - f_k \\ -\alpha_2\nabla p - \dot{m}u_{2,k} + f_k \\ \alpha_2\mathbf{u}_2\nabla p + \nabla[p\alpha_2(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)] + \dot{m}(Q_{ch} + 0.5\mathbf{u}_2^2) - (\mathbf{f}, \mathbf{u}_2) - q \\ -\alpha_2u_{2,k}\nabla p_1 - \dot{m}(Q_{ch} + 0.5\mathbf{u}_2^2) + (\mathbf{f}, \mathbf{u}_2) + q \end{pmatrix} \quad (2.1.8)$$

где $E_1 = 0.5\mathbf{u}_1^2 + e_1$, \dot{m}_j – источник массы в единице объема за единицу времени, связанный с горением пороховых элементов, q – энергия уходящая в конденсированную фазу в результате конвективного нагрева от газа. Здесь π – межгранулярное давление, которое предполагается зависящим от объемной доли к.фазы. Если последняя меньше значения плотной упаковки α_2^* , межгранулярное давление равно нулю. Если гранулы уплотняются так, что объемная доля становится больше α_2^* , возникает межгранулярное давление, которое моделируется эмпирической зависимостью вида:

$$\pi(\alpha_2) = H[\alpha_2 - \alpha_2^*] B \left[\left(\frac{1 - \alpha_2^*}{1 - \alpha_2} \right)^k - 1 \right], \quad (2.1.9)$$

где параметры B, k, α_2^* – эмпирические константы, определяемые на основе экспериментальных данных, H – функция Хевисайда.

Зерна ЭМ имеют следующие начальные характеристики: геометрические размеры, начальную пористость, характерный размер, толщину пленки ингибитора. Отдельное пороховое зерно имеет форму цилиндра с заданными диаметром и длиной. Зерно также может иметь внутренние продольные каналы.

В зарядах насыпной плотности площадь контакта соседних пороховых зерен пренебрежимо мала. При прессовании зерен с поверхностью A пятна контакта на наружной поверхности зерен увеличиваются. Промежутки между зернами, открытые для течения газа, образуют систему пор с поверхностью A_s . Уменьшение поверхности зерен, открытой для действия газа, моделируется с помощью коэффициента $\Sigma = A_s/A$. Для величины Σ и пористости α_1 в [32] указана аналитическая зависимость от приведенного расстояния между центрами частиц. Начальное значение доли горячей поверхности ВЗКГ $\Sigma_0 = \Sigma(t=0)$ определяется пористостью, до которой был спрессован блок энергетического материала в процессе изготовления [32].

Система (2.1.5) дополняется уравнениями сохранения для параметров, которые характеризуют текущее состояние каждого элемента конденсированной фазы. Эти уравнения имеют вид равенства нулю лагранжевой производной по скорости дисперсной фазы, $D_s l_p / D_t = 0$. В качестве параметра состояния зерна l_p мы используем приведенный диаметр зерна d , относительную толщину сгоревшего свода зерна z_j , профиль температуры свода вблизи открытой поверхности порохового зерна, являющийся решением уравнения теплопроводности на стадии воспламенения и текущее отношение поверхности пор к поверхности зерен.

Эти параметры более подробно обсуждаются ниже.

1.2 Межфазное силовое взаимодействие

В качестве характерного линейного размера зерна при расчете межфазного силового взаимодействия в процессе воспламенения до завершения охвата зерна горением мы используем приведенный диаметр, который вычисляется по формуле:

$$d = \frac{6V}{A} \quad (2.2.1)$$

где V – объем зерна, A – площадь поверхности зерна. После завершения охвата зерна горением приведенный диаметр вычисляется в предположении геометрического закона горения зерна с использованием коэффициентов формы, полученных для недеформированного исходного зерна:

$$d = \begin{cases} \frac{6e_1(1 - \chi_1 z(1 + \lambda_1 z + \mu_1 z^2))}{\chi_1(1 + 2\lambda_1 z + 3\mu_1 z^2)}, & z < 1 \\ \frac{6e_1(1 - \chi_1 z(1 + \lambda_1 + \mu_1) - \chi_2 z(1 + \lambda_2(z-1) + \mu_1(z-1)^2))}{\chi_2(1 + 2\lambda_2(z-1) + 3\mu_1(z-1)^2)} & 1 \leq z < z_k \end{cases} \quad (2.2.2)$$

где e_1 - половина толщины свода горения порохового зерна, а χ_1, λ_1, μ_1 и χ_2, λ_2, μ_2 - коэффициенты формы для порохового зерна с каналами на прогрессивной ($z < 1$) и дегрессивной ($1 \leq z < z_k$) стадии соответственно, z - относительная толщина сгоревшего свода зерна. На дегрессивной стадии происходит горение остатков зерна, имеющих согласно предположению о геометрическом законе горения зерна форму призм. В случае использования сферического зерна (2.2.1) и (2.2.2) совпадают. В случае зерна с каналами рассмотренный подход эквивалентен использованию двух наборов коэффициентов формы переключение между которыми происходит по

завершению охвата зерна горением.

По мере горения энергетического материала пористость изменяется в широком интервале значений. В диапазоне пористостей $0.055 < \alpha_1 < 0.75$ дисперсная фаза заменяется одной эффективной фракцией сферических частиц [6], для которых сила межфазного взаимодействия определяется следующим образом:

$$\mathbf{f}_j = \frac{1}{8} \alpha_{2,j} s_p C_d \rho |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2| (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2),$$

$$\text{Re}_f = \frac{6 \rho_1 |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|}{\mu s_p}, \quad s_p = \sum_{j=1}^N \frac{\alpha_{2,j} s_j}{\alpha_2},$$
(2.2.3)

где $C_d = C_d(\alpha_1, \text{Re})$ - коэффициент сопротивления [6], s_j - отношение поверхности межфазной границы частицы к ее объему, Re - число Рейнольдса, \mathbf{u} и \mathbf{v} - вектора скорости газовой и дисперсной фаз, соответственно. В случае образцов низкой пористости зависимости для коэффициента сопротивления [6] модифицируются на основе экспериментальных данных по фильтрации азота в ВЗКГ следующим образом:

$$C_d = A \frac{\alpha_2}{\alpha_1 \text{Re}_f} + B,$$

$$s_j = \frac{6}{d} \Sigma,$$
(2.2.4)

где коэффициенты $A = A_m / \Sigma^2$ и $B = B_m / \Sigma$:

$$B_m = \begin{cases} 0.4 / (\alpha_1 - 0.03), & 0.055 < \alpha_1 < 0.12 \\ 4.4 - 14.857(\alpha_1 - 0.12), & 0.12 < \alpha_1 < 0.4 \end{cases}$$

$$A_m = \begin{cases} 10.2 / (\alpha_1 - 0.001), & 0.055 < \alpha_1 < 0.3 \\ 7.8 / (\alpha_1 - 0.068), & 0.3 < \alpha_1 < 0.4 \end{cases}$$
(2.2.5)

Аналитическая аппроксимация $\Sigma(\alpha_1)$ строится в предположении, что при уплотнении упаковки происходит пластическая деформация зерен в местах

контакта, приводящая к тому, что зерно принимает форму сферы с 6 срезанными сферическими сегментами в местах контакта с соседними зернами. Так как при деформации зерна его объем не изменяется, то радиус сферической поверхности деформированного зерна возрастает. Введем безразмерный параметр $Z = H / R$, где H - расстояние между центрами соседних сфер, R - радиус зерна. Параметр Z изменяется в интервале от 1.38 для дисперсной фазы с нулевой пористостью до 2 в случае насыпного слоя с точечным контактом частиц. При пористости менее 0.2 доля поверхности зерна, закрытой пятнами контакта ω составляет более половины. Характеристики уплотненного слоя могут быть получены из следующих зависимостей [32]:

$$\alpha_1 = 1 - \pi \left(\frac{3}{Z^2} - \frac{8}{3Z^3} - \frac{1}{4} \right) \quad (2.2.6)$$

$$\omega = 3 \left(1 - \frac{Z}{2} \right) \quad (2.2.7)$$

$$\frac{R}{R_0} = \left(\frac{9Z}{4} - 2 - \frac{3Z^3}{16} \right)^{-1/3}, \quad (2.2.8)$$

$$F_A = \frac{A_s}{A_{s0}} = \frac{4(3Z - 4)}{Z^3} \left(\frac{R_0}{R} \right), \quad (2.2.9)$$

где A_s и A_{s0} поверхность пор в единице объема при пористости α_1 и при насыпной пористости соответственно. Поверхность пор в единице объема дисперсной фазы вычисляется из соотношения $s_j(1 - \alpha_1) = A_s$.

В диапазоне пористостей $0.75 < \alpha_1 < 1$, где частицы дисперсной фазы не оказывают заметного влияния на движение друг друга, сила сопротивления f_j , действующая на газ со стороны j -го компонента дисперсной фазы за исключением пленки, определяется формулой:

$$\mathbf{f}_j = \frac{1}{8} \alpha_{2,j} s_j C d_j \rho_1 |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2| (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (2.2.10)$$

$$\text{Re}_f = \frac{6 \rho_1 |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|}{\mu s_j}$$

где C_j – коэффициенты сопротивления из [6], зависящие от числа Рейнольдса и пористости.

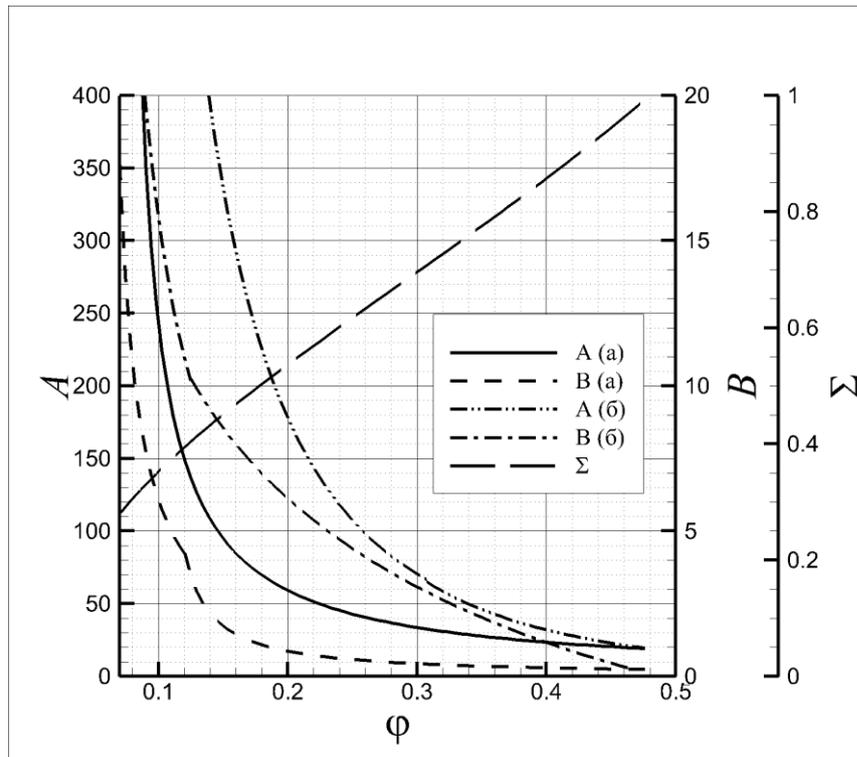


Рисунок 1- Сравнение параметров в коэффициенте сопротивления: а) - [6], б) используемое приближение.

1.3 Межфазное тепловое взаимодействие

Теплообмен между фазами учитывается в кинетической модели горения одиночного зерна и в определении параметра q в уравнении энергии газовой фазы. Интенсивность межфазного теплообмена для j -го компонента дисперсной фазы вычисляется через коэффициент теплопередачи $\alpha_j^q = s_j \lambda_g \text{Nu} / 6$, который определяется числом Нуссельта. Для теплообмена в насыпных слоях высокой пористости, согласно [16]:

$$\text{Nu} = \begin{cases} 2 + 0.106\alpha_1 \text{Re} \text{Pr}^{1/3}, & \text{при } \text{Re} < 200 \\ 2.27 + 0.6(\alpha_1 \text{Re})^{2/3} \text{Pr}^{1/3}, & \text{при } \text{Re} > 200 \end{cases} \quad (2.3.1)$$

где

$$\text{Pr} = \frac{\mu C_p}{\lambda_g}, \quad (2.3.2)$$

а μ, C_p, λ_g – динамическая вязкость, теплоемкость при постоянном давлении и теплопроводность смеси газов соответственно. Динамическая вязкость μ рассматривается как функция температуры и состава смеси. Теплоемкость смеси при постоянном давлении также рассматривается в виде функции температуры и состава смеси, причем для воздуха использовались зависимости [45].

Теплообмен в высокоплотном энергетическом материале рассчитывается на основе канальной модели. Исходя из известного эффективного диаметра и зависимости открытой (не занятой пятнами контакта) удельной поверхности F_A от пористости [32], можно определить диаметр эквивалентных по площади прямых цилиндрических каналов в виде:

$$d_k = 4\alpha_1 d / 6\alpha_2 F_A \quad (2.3.3)$$

Для расчета теплообмена на стенках каналов используется выражение для числа Нуссельта из [46]:

$$\begin{aligned} \text{Nu}_q &= C (\text{Re}_q)^{2/3} \text{Pr}^{1/3}, \\ \text{Re}_q &= \frac{d_q \rho |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2|}{\mu}, \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

где значение константы берется равным $C = 0.2$.

Для пленки поливинилбутираля задавалось постоянное значение теплоемкости при постоянном давлении, равное 2884 Дж/кг/К, полученное в результате термодинамического расчета для вещества с химической формулой

$C_8H_{12}O_2$. Теплопроводность смеси газов вычислялась в предположении постоянного числа $Pr=0.8$ из соотношения (2.3.2).

1.4 Модель воспламенения пленки

Начальной стадией моделирования процесса конвективного горения является определение момента начала пиролиза пленки в порах. 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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_j}{\partial t} &= \frac{\lambda_j}{c_j \rho_{2,j}^0} \frac{\partial^2 T_j}{\partial y^2}; \\ y = e_j + h_0: \frac{\partial T_j}{\partial y} &= \alpha_j^q (T - T_j); \\ y = 0: T_j &= T_{oj}; \\ t = 0: T &= T_{0j}; \end{aligned} \quad (2.4.1)$$

где e_j - половина толщины свода горения порохового элемента, h_0 - толщина пленки.

1.5 Моделирование пиролиза пленки

После достижения температуры T_B начинается стадия пиролиза пленки в порах. Модель пиролиза 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 и нагрев до температуры T_B :

$$\dot{m}_{film} = \frac{\alpha_{film}(T - T_B)}{Q_B + c_B(T_B - T_0)} A_s \quad (2.5.1)$$

Пиролиз проходит в квазистационарном режиме при постоянной температуре T_B на поверхности пленки. Стадия завершается, когда заданная доля полимера, находящаяся на открытой поверхности порохового зерна (поверхности поры) A_s , переходит в газовую фазу. Уравнение для изменения относительной толщины пленки в порах по времени может быть записано в следующем виде:

$$\frac{dz_{film}}{dt} = \frac{\alpha_{film}^q (T - T_B)}{h_0 \rho_{2,film} (Q_B + c_B (T_B - T_0))} \quad (2.5.2)$$

где $z_{film} = h / h_0$ - отношение толщины пленки, пиролизовавшейся к данному моменту к начальной. Параметр z_{film} является лагранжевым по скорости дисперсной фазы. Величина z_{film} изменяется в диапазоне от 0 до $\min(1, z_f)$ и задает долю пиролизовавшейся пленки в предположении послойного пиролиза на поверхности пор.

По завершении пиролиза пор начинается стадия нагрева поверхности пороха. Если температура на поверхности заряда, полученная при решении одномерной краевой задачи теплопроводности (2.4.1), ниже заданной температуры воспламенения энергетического материала, то решение уравнения теплопроводности продолжается, иначе образец считается воспламенившимся, и включается модель, описывающая процесс его горения.

1.6 Моделирование изменения поверхности зерна при пиролизе пленки

Горение энергетических материалов без пленки полимера обычно моделируется на основе геометрического закона горения. В данной модели деформация зерна, связанная с прессованием зерен, не учитывается. При горении ВЗКГ рассматривается только эффект, связанный с горением зерна по

неполной поверхности. Моделирование этой стадии осуществляется на основе экспериментальных наблюдений [39], которые говорят о том, что охват происходит постепенно с приблизительно линейным ростом поверхности горения во времени, который изменяется обратно пропорционально толщине пленки. Для описания этого процесса в модель вводится переходная функция $G(\tau) = \Sigma_0 + g\tau$, являющаяся множителем к текущей абсолютной поверхности зерна, которая в момент воспламенения зерна (при $\tau = 0$) равна Σ_0 , а в момент завершения охвата (при $\tau = (1 - \Sigma_0) / g$) равна 1.

В ходе охвата горением одновременно с ростом поверхности зерна, по которой идет горение, идет пиролиз оставшейся в области пятен контакта пленки, а масса пороховых зерен, приходящаяся на единицу объема, уменьшается со скоростью:

$$\dot{m}_j = \frac{6\alpha_{2,j}\rho_{2,j}^0}{d_j} UG \quad (3.1.1)$$

где U – скорость послойного горения, которая является известной функцией давления. Для согласования доли поверхности зерна ЭМ, охваченной горением, и объемной доли пленки поливинилбутираля, уравнение изменения объемной доли пленки было реализовано в виде:

$$\frac{d\alpha_{2,film}\rho_{2,film}^0}{dt} = -\frac{\alpha_{2,film}\rho_{2,film}^0}{\tau} \quad \tau = \frac{1 - \Sigma_0}{g} = const \quad (3.1.2)$$

Пиролиз при этом идет независимо от теплового потока в пленку, а завершение стадии охвата зерна горением, определяемое по величине параметра G , совпадает с убылью объемной доли пленки до 0.

1.7 Горение энергетического материала

После завершения стадии охвата горением всей поверхности зерна горение происходит по геометрическому закону горения, аналогично зернам,

не покрытым пленкой полимера. Скорость послойного горения пироксилинового пороха пропорциональна давлению в газе с фиксированным коэффициентом пропорциональности. При моделировании горения рассматривались два подхода, соответствующих предположению о горении зерна только по внешней поверхности и по полной поверхности с учетом каналов. В первом случае, называемом далее “сферический порох” зерно имеет эквивалентный диаметр 3.6мм, а его коэффициенты формы соответствуют сфере. Во втором случае зерно имеет диаметр 2.73мм и при его горении после полного охвата используется один набор из коэффициентов $\chi_1, \lambda_1, \mu_1, \chi_2, \lambda_2, \mu_2$ (порох 5/7).

Глава 2 Численный метод

2.1 Базовая система уравнений

Рассмотрим упрощенную двухфазную модель с одной компонентой (исключая индекс j), которая описывает в континуальном приближении динамику смеси газа и твердых частиц [6,15]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \mathbf{u}_2) &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 + p) &= \alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_1, \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 + \alpha_2 \pi) &= -\alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_2, \\ \frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 E_1 \mathbf{u}_1 + p \mathbf{u}_1) &= \alpha_2 \mathbf{u}_2 \nabla p + \nabla[p \alpha_2 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)] + \mathbf{u}_2 \mathbf{f}_1 + q_1, \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2 E_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 E_2 \mathbf{u}_2 + \alpha_2 \pi \mathbf{u}_2) &= -\alpha_2 \mathbf{u}_2 \nabla p + \mathbf{u}_2 \mathbf{f}_2 + q_2\end{aligned}\tag{3.1.3}$$

Отметим, что уравнение энергии для к-фазы может быть приведено к уравнению для внутренней энергии к-фазы e_2 и далее преобразовано к уравнению теплопроводности (2.4.1) относительно температуры к-фазы T_2 . Последняя нужна только для описания межфазного теплообмена, поэтому в дальнейшем это уравнение не рассматривается.

Уравнение для энтропии газа s_1 может быть получено из подсистемы уравнений газовой фазы стандартным образом. Оно имеет следующий вид:

$$\alpha_1 \rho_1 T_1 \left(\frac{\partial s_1}{\partial t} + u_1 \nabla s_1 \right) = (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) \mathbf{f}_1 + q_1.\tag{3.1.4}$$

Таким образом, система уравнений (3.1.3) является термодинамически согласованной. Для анализа гиперболичности рассмотрим систему уравнений (3.1.3) в одномерном случае и запишем ее в примитивных переменных в виде

$\mathbf{z}'_t + \mathbf{A}\mathbf{z}'_x = 0$, где $\mathbf{z} = (\alpha_2, u_2, p_1, u_1, s_1)$,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} u_2 & \alpha_2 & 0 & 0 & 0 \\ \Pi / \alpha_2 & u_2 & 1 / \rho_2 & 0 & 0 \\ \rho_1 c^2 (u_2 - u_1) / \alpha_1 & 0 & u_1 & \alpha_2 \rho_1 c^2 / \alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 / \rho_1 & u_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 \end{pmatrix}, \quad (3.1.5)$$

где $\Pi = (\pi_2 + \alpha_2 \partial \pi_2 / \partial \alpha_2) / \rho_2$, $c^2 = (\partial p / \partial \rho_1)_{s_1}$. Собственные значения матрицы (3.1.5) являются корнями характеристического уравнения:

$$(u_1 - \lambda) \left((u_2 - \lambda)^2 - \Pi \right) \left((u_1 - \lambda)^2 - c^2 \right) - r c^2 (u_1 - \lambda)^2 = 0 \quad (3.1.6)$$

где $r = \alpha_2 \rho_1 / \alpha_1 \rho_2$. Отсюда следует, что при некоторых значениях параметров течения возможны комплексные значения λ , поэтому система уравнений (3.1.5) не является гиперболической.

2.2 Регуляризация модели

Как было отмечено выше, модель базовая система уравнений не является строго гиперболической. Постановка для нее эволюционной задачи Коши, вообще говоря, не корректна. Предлагается ее регуляризовать, и устранить указанный недостаток на дискретном уровне путем введения на каждом временном шаге интегрирования расщепления специального вида.

Первую стадию можно рассматривать как движение смеси без учета межфазного взаимодействия, а вторую – как чисто межфазное взаимодействие. Таким образом на первой стадии решается система уравнений (3.1.3) без правых частей и уравнения энергии для к.фазы, которое служит для определения температуры к.фазы:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \mathbf{u}_2) &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 + p) &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 + \alpha_2 \pi) &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 E_1 \mathbf{u}_1 + p \mathbf{u}_1) &= 0,
\end{aligned} \tag{3.1.7}$$

а на второй учитывается межфазное взаимодействие –

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}{\partial t} &= \alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_1, \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}{\partial t} &= -\alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_2, \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} &= \alpha_2 \mathbf{u}_2 \nabla p + \nabla [p \alpha_2 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)] + \mathbf{u}_2 \mathbf{f}_1 + q_1, \\
\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} &= 0.
\end{aligned} \tag{3.1.8}$$

В рассматриваемом случае система уравнений (3.1.7) расщепляется на уравнения динамики к-фазы:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \nabla \alpha_2 \mathbf{u}_2 &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \otimes \mathbf{u}_2 + \alpha_2 \pi) &= 0,
\end{aligned} \tag{3.1.9}$$

которые определяют решение α_2 и \mathbf{u}_2 , и уравнения газовой фазы:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1) &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \otimes \mathbf{u}_1 + p) &= 0, \\
\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 E_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 E_1 \mathbf{u}_1 + p \mathbf{u}_1) &= 0,
\end{aligned} \tag{3.1.10}$$

для нахождения оставшихся компонент решения ρ_1 , \mathbf{u}_1 и p .

Система уравнений (3.1.9) с аппроксимацией межгранулярного давления в виде (2.1.9) описывает в континуальном приближении динамику ансамбля твердых недеформируемых частиц в вакууме. В одномерном случае и примитивных переменных в неконсервативном виде эта система может быть записана как:

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + u_2 \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \frac{c_2^2}{\alpha_2} \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} + u_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} = 0. \end{cases} \tag{3.1.11}$$

Ее можно переписать в векторном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{z}_2}{\partial t} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \mathbf{z}_2}{\partial x} = 0, \tag{3.1.12}$$

где $\mathbf{z}_2 = (\alpha_2, u_2)$, а

$$\mathbf{A}_2 = \begin{vmatrix} u_2 & \alpha_2 \\ \frac{c_2^2}{\alpha_2} & u_2 \end{vmatrix}. \tag{3.1.13}$$

Матрица системы уравнений (3.1.12) имеет два собственных значения:

$$\lambda_{1,2} = u_2 \pm c_2, \tag{3.1.14}$$

где $c_2^2 = \partial(\alpha_2 \pi) / \partial \alpha_2$ и может интерпретироваться как квадрат скорости распространения слабых разрывов. При аппроксимации межгранулярного

давления в виде (2.1.9) имеем:

$$c_2 = \sqrt{\pi \left(1 + \frac{\alpha_2 k}{1 - \alpha_2} \right) + \frac{\alpha_2 Bk}{\rho_2 (1 - \alpha_2)}} \quad (3.1.15)$$

Система уравнений (3.1.12) является гиперболической. При отличном от нуля межгранулярном давлении имеются два различных собственных значения. Когда межгранулярное давление вырождается, система имеет одно собственное значение двойной кратности.

Рассматриваемая модель допускает разрывные решения. Соотношения на сильном разрыве связывают значения скорости и объемной доли слева и справа от разрыва. Они выводятся из консервативной системы уравнений (3.1.9) и имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \alpha_2 u_2 - \alpha_{2,0} u_{2,0} = D(\alpha_2 - \alpha_{2,0}) \\ \alpha_2 u_2^2 + \alpha_2 \pi - \alpha_{2,0} u_{2,0}^2 - \alpha_{2,0} \pi_0 = D(\alpha_2 u_2 - \alpha_{2,0} u_{2,0}) \end{cases} \quad (3.1.16)$$

где D - скорость распространения сильного разрыва, а параметры с индексом 0 относятся к невозмущенной области.

Следует также отметить и важное свойство системы уравнений газовой фазы (3.1.10), которое позволяет построить численный метод ее решения на основе разработанных методов классической газовой динамики. Действительно, нетрудно убедиться, что введением средней плотности $\bar{\rho}_1 = \rho_1 \alpha_1$ система уравнений газовой фазы (3.1.10) переходит в стандартную систему уравнений Эйлера относительно переменных $\bar{\rho}_1$, u_1 и p . Уравнение состояния при этом сведется к следующему виду:

$$p = (\bar{\gamma} - 1) \bar{\rho}_1 e_1 \quad (3.1.17)$$

где $\bar{\gamma} = (\gamma - \alpha_2) / \alpha_1$. Таким образом, (3.1.10) можно рассматривать как классическую систему уравнений газовой динамики калорически совершенного газа с той лишь разницей, что показатель зависит от

пространственного распределения объемной доли к-фазы.

Таким образом система (3.1.7) является гиперболической и имеет пять собственных значений:

$$\lambda_{1,2} = u_2 \pm c_2 \quad \lambda_{3,4} = u_1 \pm c_1 \quad \lambda_5 = u_1 \quad (3.1.18)$$

где $c_1 = \sqrt{p (\gamma - \alpha_2) / \rho_1 \alpha_1^2}$.

2.3 Численная схема

Рассматривается двумерная осесимметричная модель. Все параметры течения зависят от двух пространственных переменных z, r отсчитываемых вдоль и поперек оси симметрии соответственно.

Применение метода конечных объемов приводит к системе дискретных алгебраических уравнений для определения средних по ячейке значений консервативного вектора на временном слое $t^{n+1} - \mathbf{q}_i^{n+1}$ по соответствующим значениям \mathbf{q}_i^n с предыдущего слоя t^n :

$$\mathbf{q}_i^{n+1} = \mathbf{q}_i^n - \frac{1}{\omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[\sum_i (\mathbf{f}n_r + \mathbf{g}n_z)_i s_i \right] dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} [(\mathbf{S}_m)_i + (\mathbf{S}_r)_i] dt, \quad (3.2.1)$$

где ω_i – площадь контрольного объема Ω_i , $\mathbf{n} = (n_z, n_r)$ – локальный вектор внешней нормали к границе Ω_i , s_i – длина бокового ребра, \mathbf{S}_m - источники массы и \mathbf{S}_r - источники, связанные с осевой симметрией, суммирование в правой части ведется по всем ребрам ячейки. Основным элементом расчетной схемы является аппроксимация потоковых членов через ребра ячеек, которая подробнее обсуждается далее.

Дискретизация уравнений проводится в единой манере с использованием интерполяционной предиктор-корректор [47] схемы второго порядка точности по времени и пространственным переменным. Это – явная двухстадийная схема, на первом этапе которой считаются промежуточные величины на половинном шаге $t^{n+1/2}$:

$$\mathbf{q}_i^* = \mathbf{q}_i^n - 0.5 \frac{\Delta t}{\omega_i} \sum_{\sigma} (\mathbf{f}(\mathbf{q}_{\sigma}) n_r + \mathbf{g}(\mathbf{q}_{\sigma}) n_z)_{\sigma} s_{\sigma} + 0.5 \left[(\mathbf{S}_p)_i + (\mathbf{S}_r)_i \right] \Delta t, \quad (3.2.2)$$

где \mathbf{q}_{σ} – значения компонентов вектора \mathbf{q} , полученные интерполяцией значений из центра ячейки. В одномерном случае для реконструкции решения в i -ой ячейке рассматриваются значения в трех соседних ячейках с индексами $i-1, i, i+1$. При этом проводится квадратичная интерполяция, которая дает значения решения в узловых точках. Процедура реконструкции описана в [48] и была обобщена на случай неравномерной сетки [49]:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^{\pm} &= \mathbf{z} \pm 0.5 s \delta^{\pm} \left[(1 - sk^{\pm}) \Delta^{\mp} + (1 + sk^{\pm}) \Delta^{\pm} \right] \\ \Delta^+ &= \mathbf{z}_{i+1} - \mathbf{z}_i \\ \Delta^- &= \mathbf{z}_i - \mathbf{z}_{i-1} \\ \delta^+ &= \frac{h_i}{h_i + h_{i+1}}, \quad \delta^- = \frac{h_i}{h_i + h_{i-1}} \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

где $k(\delta) = (12\delta^2 - 1) / 12\delta$ – функция, определяющая порядок интерполяционной схемы. На равномерной сетке параметр k константа; выбор $k = -1$ приводит к стандартной схеме MUSCL второго порядка, $k = 1$ соответствует неустойчивой центрально разностной схеме второго порядка, $k = 0$ – схеме Фромма, а при $k = 1/3$ схема становится схемой третьего порядка аппроксимации [48]. При этом $s = \max\left(0, 2\Delta^+ \Delta^- / (\Delta^+ \Delta^+ + \Delta^- \Delta^- + \varepsilon)\right)$ в (3.2.3), что соответствует ограничителю производных Ван-Альбада [50]. Указанный выше выбор коэффициента k является обобщением схемы MUSCL с $k = 1/3$ на случай неравномерной сетки и приводит к системе дискретных уравнений:

$$\mathbf{q}_i^{n+1} = \mathbf{q}_i^n - \frac{\Delta t}{\omega_i} \sum_{\sigma} T_{\sigma}^{-1} \mathbf{F}_{\sigma}^* s_{\sigma} + \left[(\mathbf{S}_p^*)_i + (\mathbf{S}_r^*)_i \right] \Delta t, \quad (3.2.4)$$

где \mathbf{F}_{σ} – численный поток в направлении, нормальном к ребру ячейки, T_{σ} – матрица перехода из глобальной системы координат в локальную, связанную с ребром. Параметры со звездой вычисляются с использованием компонент

вектора \mathbf{q}_i^* . Вектор локально одномерного численного потока \mathbf{F}_σ является функцией интерполированных на границу значений примитивного вектора ячейки \mathbf{z}_i , $\mathbf{F}_\sigma = \Phi(\mathbf{z}_i^+, \mathbf{z}_i^-)$. Здесь верхние индексы "-" и "+" обозначают значение слева и справа от границы, соответственно. Функция аппроксимации численного потока Φ выбирается по методу С.К. Годунова [51] на основе решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва. Детали мы приводим в следующем разделе.

На втором шаге по полученным значениям предиктора вычисляются промежуточные значения переменных:

$$\mathbf{z}_i^{n+1/2} = \frac{(\tilde{\mathbf{z}}_i + \mathbf{z}_i^n)}{2} \quad (3.3.1)$$

и производится их аппроксимация на границу по значениям приращений с n -го шага по времени:

$$\mathbf{z}_{i,n+1/2}^\pm = \mathbf{z}_i^{n+1/2} + (\mathbf{z}_i^\pm - \mathbf{z}_i) \quad (3.3.2)$$

На завершающем этапе производится вычисление потоков:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \Phi(\mathbf{z}_{i,n+1/2}^+, \mathbf{z}_{i+1,n+1/2}^-) \quad (3.3.3)$$

Описанная схема является явной двухшаговой. Она устойчива при выполнении условия Куранта, которое в данном случае записывается в виде:

$$\Delta t \leq (h_i / (|u_{1,i}| + c_{1,i})) \quad \text{для всех } i. \quad (3.3.4)$$

2.4 Аппроксимация численного потока в к.фазе

Для выбора функции аппроксимации численного потока Φ мы применяем метод С.К. Годунова, в котором предлагается аппроксимировать численный поток на основе решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва в каждом узле. Задача Римана сводится к решению задачи Коши для

системы определяющих уравнений:

$$\frac{\partial \mathbf{q}_2}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial x} = 0 \quad (3.4.1)$$

с кусочно-постоянными начальными данными

$$\mathbf{q}_2(0, x) = \begin{cases} \mathbf{q}_{2,L}, & \text{при } x < 0 \\ \mathbf{q}_{2,R}, & \text{при } x > 0 \end{cases} \quad (3.4.2)$$

Решение задачи Римана является автомодельным, зависит от автомодельной переменной x/t . Такому условию удовлетворяют решения двух классов. Один – это разрывные решения, описывающие волны компактирования, при переходе через которые объемная доля и скорость частиц мгновенно изменяются. Исключением из соотношений на сильном разрыве (3.1.16) скорости разрыва D получается следующая зависимость скорости частиц от объемной доли за фронтом волны:

$$u_2 - u_{2,0} = \pm \sqrt{\frac{(\alpha_2 - \alpha_{2,0})(\pi\alpha_2 - \pi_0\alpha_{2,0})}{\alpha_2\alpha_{2,0}}}, \quad \text{для } \alpha_2 \geq \alpha_{2,0} \quad (3.4.3)$$

где нижний индекс «0» обозначает фоновые значения (перед фронтом волны), соответственно $\pi_0 = \pi(\alpha_{2,0}, \rho_2)$, то есть не совпадает с индексом «L» в формуле (3.4.2). Выражение (3.4.3) со знаком «+» отвечает волне, которая называется правой. В ней массовый расход $\dot{m} = \alpha_2(u_2 - D) = \alpha_{2,0}(u_{2,0} - D)$ меньше нуля, так что частицы с невозмущенными параметрами $(\alpha_{2,0}, u_{2,0})$ переходят через разрыв справа налево. Соответственно, знак «-» берется для левой волны, для которой массовый расход больше нуля, и частицы с параметрами $(\alpha_{2,0}, u_0)$ пересекают разрыв слева направо.

Соотношения на сильном разрыве (3.1.16) рассматриваются только для значений $\alpha_2 \geq \alpha_{2,0}$. Ветвь $\alpha_2 < \alpha_{2,0}$, в принципе, тоже имеет место. Она соответствует «скачку раскомпактирования». Однако, эта ветвь должна быть

отброшена, так как она соответствует неустойчивым к малым возмущениям решениям, что было показано Лаксом в общем случае произвольной гиперболической системы уравнений в форме закона сохранения [52].

Другой класс решений описывает центрированную волну раскомпактирования, в которой параметры течения меняются непрерывно в зависимости от автомодельной переменной. Соотношения в волне раскомпактирования определяют функциональную зависимость скорости от объемной доли для значений $\alpha_2 \leq \alpha_{2,0}$ и имеют следующий вид:

$$u_2 = u_{2,0} \pm \int_{\alpha_{2,0}}^{\max(\alpha_2, \alpha_2^*)} \frac{c_2(\alpha_2) d\alpha_2}{\alpha_2} \quad \text{для } \alpha_2 \leq \alpha_{2,0}, \quad (3.4.4)$$

$$u_2 \pm c_2 = \lambda = x/t,$$

где верхний знак отвечает правой волне с $\lambda_1 = u_2 + c_2$, а нижний – левой с $\lambda_2 = u_2 - c_2$. Для правой волны невозмущенная область с параметрами $(\alpha_{2,0}, u_{2,0})$ располагается справа от волны, а для левой – слева от волны. Из дифференциальных соотношений центрированной волны $\lambda \alpha_2' - (u_2 \alpha_2)' = 0$, где штрих обозначает производную по λ , можно показать, что для правой волны всегда $\alpha_2' > 0$, а для левой всегда $\alpha_2' < 0$. Поэтому в соотношении (3.4.4) должна рассматриваться только ветвь $\alpha_2 \leq \alpha_{2,0}$.

Таким образом, принимая во внимание вышесказанное, при переходе через правую волну скорость является функцией объемной доли,

$$u_2 = u_2(\alpha_2, \alpha_{2,0}, u_{2,0}) = \begin{cases} u_{2,0} + \sqrt{\frac{(\alpha_2 - \alpha_{2,0})(\pi\alpha_2 - \pi_0\alpha_{2,0})}{\beta\beta_0}}, & \text{для } \alpha_2 \geq \alpha_{2,0} \\ u_{2,0} + \int_{\alpha_{2,0}}^{\max(\alpha_2, \alpha_2^*)} \frac{c_2(\alpha_2) d\alpha_2}{\alpha_2}, & \text{для } \alpha_2 < \alpha_{2,0} \end{cases} \quad (3.4.5)$$

а при переходе через левую волну –

$$u_2 = u_2(\alpha_2, \alpha_{2,0}, u_{2,0}) = \begin{cases} u_{2,0} - \sqrt{\frac{(\alpha_2 - \alpha_{2,0})(\pi\alpha_2 - \pi_0\alpha_{2,0})}{\alpha_2\alpha_{2,0}}}, & \text{для } \alpha_2 \geq \alpha_{2,0} \\ u_{2,0} - \int_{\alpha_{2,0}}^{\max(\alpha_2, \alpha_2^*)} \frac{c_2(\alpha_2)d\alpha_2}{\alpha_2} & \text{для } \alpha_2 < \alpha_{2,0} \end{cases} \quad (3.4.6)$$

Вычисление интеграла в правой части (3.4.4) приводит к достаточно громоздким формулам. Поэтому можно рассмотреть простую квадратичную аппроксимацию для скорости звука, которая заметно упростит последующие рассуждения.

Пусть $\bar{\alpha}_2$ - некоторое фиксированное закритическое значение объемной доли, $\bar{\alpha}_2 > \alpha_2^*$. Обозначим $\bar{c}_2 = c_2(\bar{\alpha}_2)$, $c_{2,*} = c_2(\alpha_2^*)$, $c'_{2,*} = c'_2(\alpha_2^*)$. Тогда квадратичная аппроксимация характеристической скорости $c_2 = \tilde{c}_2(\alpha_2)$ на интервале $[\alpha_2^*, \bar{\alpha}_2]$ имеет следующий вид:

$$\tilde{c}_2(\alpha_2) = A\alpha_2^2 + B\alpha_2 + C, \quad \alpha_2 \in [\alpha_2^*, \bar{\alpha}_2] \quad (3.4.7)$$

где коэффициенты определяются из условия сопряжений $\tilde{c}(\alpha_2^*) = c_{2,*}$, $\tilde{c}(\bar{\alpha}_2) = \bar{c}_2$, $\tilde{c}'(\alpha_2^*) = c'_{2,*}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} A &= \frac{-c_{2,*} + c'_{2,*}\alpha_2^* - c'_{2,*}\bar{\alpha}_2 + \bar{c}_2}{(\alpha_2^* - \bar{\alpha}_2)^2}, \\ B &= \frac{2c_{2,*}\alpha_2^* - c'_{2,*}(\alpha_2^*)^2 + c'_{2,*}(\bar{\alpha}_2)^2 - 2\bar{c}_2\alpha_2^*}{(\alpha_2^* - \bar{\alpha}_2)^2}, \\ C &= \frac{-2c_{2,*}\alpha_2^*\bar{\alpha}_2 + c_{2,*}(\bar{\alpha}_2)^2 + c'_{2,*}(\alpha_2^*)^2\bar{\alpha}_2 - c'_{2,*}\alpha_2^*(\bar{\alpha}_2)^2 + \bar{c}_2(\alpha_2^*)^2}{(\alpha_2^* - \bar{\alpha}_2)^2}. \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

Используя эту квадратичную аппроксимацию на интервале $[\alpha_2^*, \alpha_2]$, интеграл (3.4.4) может быть приближенно вычислен так:

$$\int_{\alpha_{2,0}}^{\alpha_2} \frac{c_2}{\alpha_2} d\alpha_2 = \frac{A}{2}(\alpha_2^2 - \alpha_{2,0}^2) + B(\alpha_2 - \alpha_{2,0}) + C \ln(\alpha_2 / \alpha_{2,0}). \quad (3.4.9)$$

Решение задачи Римана строится из двух волн, левой и правой, которые отделяют возмущенную область от, соответственно, левой и правой невозмущенных областей. Для построения такого решения введем функции $F_L(\alpha_2, \alpha_{2,L}, u_{2,L})$ и $F_R(\alpha_2, \alpha_{2,R}, u_{2,R})$, определяющие состояние за левой и правой волной, отделяющей невозмущенное состояние от возмущенного, соответственно:

$$F_L(\alpha_2, \alpha_{2,L}, u_{2,L}) = \begin{cases} u_L - \sqrt{\frac{(\alpha_2 - \alpha_{2,L})(\pi\alpha_2 - \pi_L\alpha_{2,L})}{\alpha_2\alpha_{2,L}}}, & \text{для } \alpha_2 \geq \alpha_{2,L} \\ u_{2,L} - A_L(\alpha_2^2 - \alpha_{2,L}^2)/2 - B_L(\alpha_2 - \alpha_{2,L}) - C_L \ln(\alpha_2 / \alpha_{2,L}), & \text{для } \alpha_2 < \alpha_{2,L} \end{cases} \quad (3.4.10)$$

$$F_R(\alpha_2, \alpha_{2,R}, u_{2,R}) = \begin{cases} u_{2,R} + \sqrt{\frac{(\alpha_2 - \alpha_{2,R})(\pi\alpha_2 - \pi_R\alpha_{2,R})}{\alpha_2\alpha_{2,R}}}, & \text{для } \alpha_2 \geq \alpha_{2,R} \\ u_{2,R} + A_R(\alpha_2^2 - \alpha_{2,R}^2)/2 + B_R(\alpha_2 - \alpha_{2,R}) + C_R \ln(\alpha_2 / \alpha_{2,R}), & \text{для } \alpha_2 < \alpha_{2,R} \end{cases} \quad (3.4.11)$$

где соотношения для волн раскомпактирования в (3.4.10) и (3.4.11) следует рассматривать только для значений $\alpha_{2,L/R} > \alpha_2^*$. Если в невозмущенной области

$\alpha_{2,L/R} \leq \alpha_2^*$, то соответствующие функции редуцируются в константы,

$$F_{L/R} = u_{2,L/R}.$$

Для значений невозмущенной объемной доли выше критической зависимости для волн раскомпактирования в (3.4.10) и (3.4.11) следует рассматривать только для значений $\alpha_2 > \alpha_2^*$. При $\alpha_2 \leq \alpha_2^*$ скорость звука $c_2 \equiv 0$ и функции $F_{L/R} = u_{2,L/R}$.

Решение задачи Римана зависит от решения нелинейного уравнения

$$F_L(\alpha_2, \alpha_{2,L}, u_{2,L}) = F_R(\alpha_2, \alpha_{2,R}, u_{2,R}), \quad (3.4.12)$$

которое определяет значение объемной доли в возмущенной области между правой и левой волной. Нетрудно увидеть, что это уравнение в зависимости от начальных данных всегда имеет либо один корень, либо не имеет решений вообще. В зависимости от этого в задаче Римана возникают различные волновые конфигурации, которые можно разбить на следующие пять типов.

I. Конфигурация без нарушения сплошности среды. В этом случае при распаде начального разрыва возникает возмущенная область с параметрами $\alpha_{2,S} > \alpha_2^*$ и $u_{2,S}$, которую отделяют от невозмущенных начальных данных, соответственно, левая и правая волны. Эти волны могут быть либо волной компактирования, либо волной раскомпактирования частиц. Скорости этих волн обозначим λ_L и λ_R .

II. Конфигурация с областью без частиц слева. Эта конфигурация возникает при $\alpha_{2,L} \leq \alpha_2^*$ и раскомпактировании сжатых частиц справа от начального разрыва с образованием вакуумной зоны без частиц $u_{2,R} \leq \lambda \leq \lambda_{2,SR}$. Правая граница вакуумной зоны является лагранжевой и движется со скоростью λ_{SR} , равной скорости частиц. Правая возмущенная область соответствует волне раскомпактирования, в которой параметры меняются от значений невозмущенной области до значений $(\alpha_{2,SR}, u_{2,SR})$, где $\alpha_{2,SR} = \alpha_2^*$. Скорость слабого разрыва, отделяющего возмущенную правую область от невозмущенной, обозначим λ_R .

III. Конфигурация с областью без частиц справа. Эта конфигурация аналогична предыдущей и отвечает ситуации, когда волна раскомпактирования находится слева, а вакуумная область без частиц формируется справа. Скорость волны раскомпактирования λ_L . Границы с вакуумной зоной - $\lambda_{SL} = u_{2,SL}$.

IV. Конфигурация с двумя волнами раскомпактирования, разделенных

областью без частиц. Эта ситуация возникает при распаде начального разрыва в сжатых до закритических значений объемной доли частицах, когда формируются две волны раскомпактирования с образованием вакуумной зоны без частиц. В волнах компактирования параметры среды меняются в соответствии с (3.4.10) и (3.4.11) от значений в невозмущенных зонах до значений, отвечающих объемной доли плотной упаковки α_2^* . Вакуумная зона без частиц определяется соответствующими скоростями на крайних характеристиках, $u_{2,SL} \leq \lambda \leq u_{2,SR}$.

V. Невозмущенные области, разделенные областью без частиц. Это простейшая ситуация разреженных частиц, когда начальные данные отвечают докритическим значениям, а скорости удовлетворяют неравенству $u_{2,L} < u_{2,R}$. При этом распад начального разрыва происходит без взаимодействия частиц; слева и справа расположенные частицы просто расходятся из-за разности скоростей с образованием вакуумной зоны без частиц.

Нетрудно увидеть, что нелинейное уравнение (3.4.12), определяющее решение задачи Римана, не имеет корня при начальных условиях, соответствующих неравенству $F_L(\alpha_2^*, \alpha_{2,L}, u_{2,L}) < F_R(\alpha_2^*, \alpha_{2,R}, u_{2,R})$ (рис. 2а). При этом в зависимости от начальных данных реализуется одна из типов II-V конфигураций.

- Конфигурация II реализуется при $\alpha_{2,L} < \alpha_2^*$ и $\alpha_{2,R} > \alpha_2^*$. В этом случае $\alpha_{2,SR} = \alpha_2^*$, а $u_{2,SR} = F_R(\alpha_2^*, \alpha_{2,R}, u_{2,R}) > u_{2,L}$,
- Конфигурация III реализуется при $\alpha_{2,L} > \alpha_2^*$ и $\alpha_{2,R} < \alpha_2^*$. В этом случае $\alpha_{2,SL} = \alpha_2^*$, а $u_{2,SL} = F_L(\alpha_2^*, \alpha_{2,L}, u_{2,L}) < u_{2,R}$,
- Конфигурация IV реализуется при $\alpha_{2,L} > \alpha_2^*$ и $\alpha_{2,R} > \alpha_2^*$. В этом случае $\alpha_{2,SL} = \alpha_2^*$, $\alpha_{2,SR} = \alpha_2^*$, а $u_{2,SL} = F_L(\alpha_2^*, \alpha_{2,L}, u_{2,L})$, $u_{2,SR} = F_R(\alpha_2^*, \alpha_{2,R}, u_{2,R})$ и $u_{2,SL} < u_{2,SR}$.
- Конфигурация V реализуется при $\alpha_{2,L} \leq \alpha_2^*$ и $\alpha_{2,R} \leq \alpha_2^*$.

Если указанное выше неравенство нарушается, уравнение (3.4.12) всегда имеет один корень $\alpha_{2,S}$ (рис. 2б). Решение задачи Римана в этом случае относится к типу I и состоит из двухволновой конфигурации без нарушения сплошности. Скорость частиц в возмущенной области вычисляется в виде:

$$u_{2,S} = F(\alpha_{2,S}, \alpha_{2,L}, u_{2,L}) \quad (3.4.13)$$

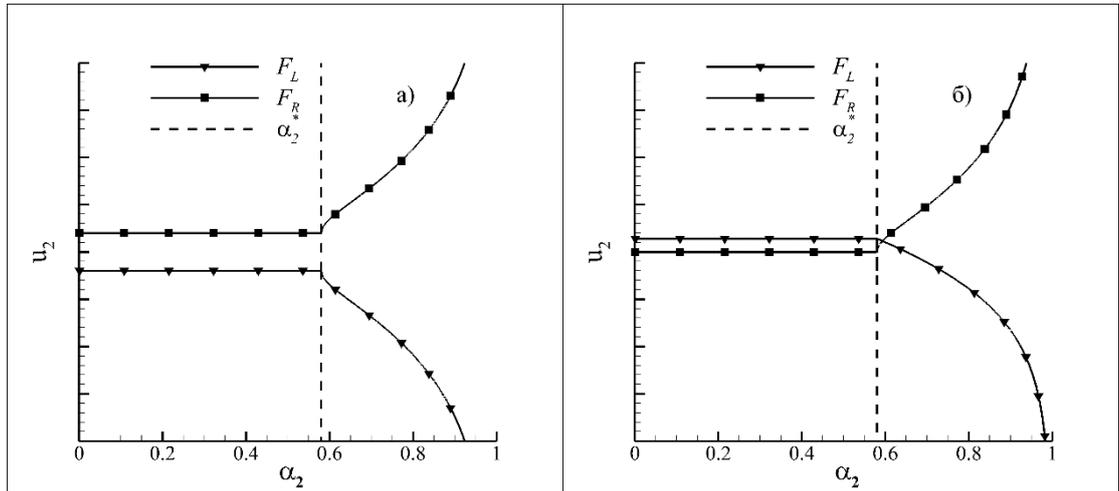


Рисунок 2- Кривые F_L и F_R , соответствующие левой и правой волне: а) уравнение (3.4.12) не имеет решения, б) уравнение (3.4.12) имеет один корень.

Для решения задачи Римана требуется нахождение корня нелинейного уравнения (3.4.12). В силу того, что функции $F_{L/R}$ кусочно-гладкие, метод ньютоновских итераций работает неустойчиво. Поэтому для решения (3.4.12) применялся менее эффективный, но более надежный метод дихотомии.

Описанное выше решение задачи Римана $\mathbf{q}^R = \mathbf{q}^R(\mathbf{q}_L, \mathbf{q}_R, \lambda)$ определяет функцию численного потока стандартным годуновским методом как значение дифференциального потока на решении задачи Римана:

$$\Phi(\mathbf{z}^-, \mathbf{z}^+) = \mathbf{F}(\mathbf{q}^R(\mathbf{z}^-, \mathbf{z}^+, \mathbf{0})). \quad (3.4.14)$$

2.5 Метод HLL для первой стадии

Для системы уравнений (3.1.7) консервативный вектор $\mathbf{q} = (\bar{\rho}_1, \bar{\rho}_1 u_1, \bar{\rho}_1 E, \bar{\rho}_2, \bar{\rho}_2 u_2)^T$, а вектор потока $\mathbf{f} = (\bar{\rho}_1 u_1, \bar{\rho}_1 u_1^2 + p_1, \bar{\rho}_1 H_1, \bar{\rho}_2 u_2, \bar{\rho}_2 u_2^2 + \pi)^T$, $H_1 = E_1 + p_1 / \bar{\rho}_1$, тогда задача Римана для нее формулируется следующим

образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} &= 0, \quad x \in (-\infty, +\infty), \quad t \geq 0 \\ \mathbf{q}(0, x) &= \begin{cases} \mathbf{q}_L, & x \leq 0 \\ \mathbf{q}_R, & x > 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.4.15)$$

Приближенное решение задачи Римана типа HLL [53] 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}^* . Они находятся из условия, чтобы удовлетворялась слабая форма дифференциальных уравнений, $\int_{\partial G} (\mathbf{q}dx - \mathbf{f}dt) = 0$ для любого замкнутого контура ∂G . Для этого достаточно потребовать, чтобы условия Ренкина-Гюгонио удовлетворялись на волнах s_L , s_R , что приводит к соотношениям:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^* &= \frac{s_R \mathbf{q}_R - s_L \mathbf{q}_L + \mathbf{f}_L - \mathbf{f}_R}{s_R - s_L}, \\ \mathbf{f}^* &= \frac{s_R \mathbf{f}_L - s_L \mathbf{f}_R + s_L s_R (\mathbf{q}_R - \mathbf{q}_L)}{s_R - s_L}. \end{aligned} \quad (3.4.16)$$

Оценка скоростей ограничивающих волн s_L и s_R проводится следующим образом. Во-первых, используем оценку Einfeldt [44] для подсистемы уравнений газовой фазы (3.1.10):

$$\begin{aligned} s_{1,L} &= \min \left[0, \min(\bar{u}_1 - \bar{c}_1, u_{1,L} - c_{1,L}) \right] \\ s_{1,R} &= \max \left[0, \max(\bar{u}_1 + \bar{c}_1, u_{1,R} + c_{1,R}) \right] \end{aligned} \quad (3.4.17)$$

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 (3.1.9) оценка проводится согласно [4]:

$$\begin{aligned}
\tilde{\alpha}_2 &= \max(\alpha_{2,L}, \alpha_{2,R}) \\
\tilde{u}_2 &= \begin{cases} \frac{u_{2,L}\sqrt{\alpha_{2,L}} + u_{2,R}\sqrt{\alpha_{2,R}}}{\sqrt{\alpha_{2,L}} + \sqrt{\alpha_{2,R}}}, & \alpha_{2,L} > 0 \text{ или } \alpha_{2,R} > 0 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} \\
\tilde{c}_2 &= c_2(\tilde{\alpha}_2) \\
s_{2,L} &= \min(\tilde{u}_2 - \tilde{c}_2, u_{2,L} - c_{2,L}, -\varepsilon) \\
s_{2,R} &= \max(\tilde{u}_2 + \tilde{c}_2, u_{2,R} + c_{2,R}, \varepsilon)
\end{aligned} \tag{3.4.18}$$

Окончательно скорости ограничивающих волн определяются как экстремальные значения скоростей распространения возмущений по газу и дисперсной фазе:

$$\begin{aligned}
s_L &= \min[s_{1,L}, s_{2,L}] \\
s_R &= \max[s_{2,R}, s_{2,R}]
\end{aligned} \tag{3.4.19}$$

Тогда соответствующее значение численного потока в приближенном методе Годунова примет вид:

$$\mathbf{f}_{i+1/2}^I(\mathbf{z}^-, \mathbf{z}^+) = \mathbf{f}^*(\mathbf{z}^-, \mathbf{z}^+) \tag{3.4.20}$$

где \mathbf{z}^- и \mathbf{z}^+ - аппроксимированные значения примитивных переменных. Используемая схема является явной двухшаговой. Она устойчива при выполнении условия Куранта, которое в данном случае записывается в виде:

$$\Delta t \leq (h / (\max(s_{L,i}, s_{R,i}))) \text{ для всех } i. \tag{3.4.21}$$

2.6 Потокосная форма метода HLL для второй стадии

Решение расщепленной системы (3.1.7), не учитывающей межфазное взаимодействие, служит начальными данными для подсистемы межфазного взаимодействия (3.1.8), которая решается на временном шаге Δt . Эта система имеет первые интегралы:

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \alpha_k(x), \\
\rho_k &= \rho_k(x), \\
\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 &= \mathbf{const}(x).
\end{aligned}
\tag{3.4.22}$$

Уравнение полной энергии газа переписываются в форме уравнений на внутреннюю энергию:

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1 e_1}{\partial t} = p \nabla [\alpha_2 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)] + (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) \mathbf{f}_1 + q_1.
\tag{3.4.23}$$

Введением среднemasсовой скорости смеси и относительной скорости фаз:

$$\bar{\rho} \mathbf{u} = \bar{\rho}_1 \mathbf{u}_1 + \bar{\rho}_2 \mathbf{u}_2, \quad \mathbf{w} = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1
\tag{3.4.24}$$

где $\bar{\rho} = \bar{\rho}_1 + \bar{\rho}_2$, $\bar{\rho}_k = \rho_k \alpha_k$, уравнение для относительной скорости преобразуется:

$$\frac{\bar{\rho}_1 \bar{\rho}_2}{\bar{\rho}} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = -\alpha_2 \nabla p + \mathbf{f}_2.
\tag{3.4.25}$$

С учетом $\rho_1 (\partial e_1 / \partial p)_{\rho_1} = 1/\Gamma$, где Γ - коэффициент Мю-Грюнайзена (для идеального газа $\Gamma = \gamma - 1$), (3.4.23) переписывается в виде:

$$\frac{\alpha_1}{\Gamma} \frac{\partial p}{\partial t} = -p \nabla (\alpha_2 \mathbf{w}) + (\mathbf{w}, \mathbf{f}_1) + q_1
\tag{3.4.26}$$

Уравнения (3.4.25) и (3.4.26) определяют \mathbf{w} и p . Это система квазилинейных уравнений первого порядка гиперболического типа. Собственные числа матрицы Якоби, определяющие скорости распространения малых возмущений, имеют вид:

$$\lambda_{1,2} = \pm \lambda, \quad \lambda = \sqrt{\frac{\Gamma p \alpha_2 \bar{\rho}}{\alpha_1 \bar{\rho}_1 \rho_2}}.
\tag{3.4.27}$$

Запишем систему уравнений (3.4.25), (3.4.26) в векторном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + C \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \mathbf{S},$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\bar{\rho}_1 \bar{\rho}_2}{\bar{\rho}} \mathbf{w} \\ \frac{\alpha_1}{\Gamma} \ln(p) \end{pmatrix}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ \alpha_2 \mathbf{w} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_2 \\ (\mathbf{w} \cdot \mathbf{f}_1 + q_1) / p \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} \alpha_2 0 \\ 0 1 \end{pmatrix}. \quad (3.4.28)$$

В силу постоянства α_2 в ячейке при записи разностной схемы:

$$\mathbf{Q}_i^{n+1} = \mathbf{Q}_i^n - \frac{\Delta t C_i}{h} (\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}) \quad (3.4.29)$$

Для аппроксимации численного потока рассмотрим задачу Римана:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + C \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0, \quad -\infty < x < +\infty$$

$$\begin{cases} \mathbf{Q} = \mathbf{Q}_L, \alpha_2 = \alpha_{2,L}, x < 0 \\ \mathbf{Q} = \mathbf{Q}_R, \alpha_2 = \alpha_{2,R}, x \geq 0 \end{cases} \quad (3.4.30)$$

Построим приближенное решение задачи типа HLL. Для этого определим скорости граничных волн возмущенной области, как:

$$s_L = -\lambda(\alpha_{2,L}, \mathbf{Q}_L), \quad s_R = \lambda(\alpha_{2,R}, \mathbf{Q}_R). \quad (3.4.31)$$

Решение в возмущенной области будем искать в виде кусочно-постоянной функции:

$$\mathbf{Q} = \begin{cases} \mathbf{Q}_L^*, & s_L \leq x/t \leq 0 \\ \mathbf{Q}_R^*, & 0 \leq x/t \leq s_R \end{cases} \quad (3.4.32)$$

$$\Phi = \Phi^*, \quad s_L \leq x/t \leq s_R$$

Структура векторов $\mathbf{Q}_{L/R}^*$ определяется соотношениями:

$$\mathbf{Q}_{L/R}^* = \mathbf{B}_{L/R} \mathbf{Q}^*$$

$$\mathbf{B}_{L/R} = \begin{pmatrix} \bar{\rho}_1 \rho_2 / \bar{\rho} & 0 \\ 0 & \alpha_1 / \Gamma \end{pmatrix} \quad (3.4.33)$$

Из соотношений Ренкина-Гюгонио на ограничивающих возмущенную область волнах:

$$\begin{cases} s_L(\mathbf{Q}_L - B_L \mathbf{Q}^*) = C_L(\Phi_L - \Phi^*) \\ s_R(\mathbf{Q}_R - B_R \mathbf{Q}^*) = C_R(\Phi_R - \Phi^*) \end{cases} \quad (3.4.34)$$

значения \mathbf{Q}^* и Φ^* определяются в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^* &= \frac{C_L \mathbf{F}_R - C_R \mathbf{F}_L}{C_R s_L \mathbf{B}_L - C_L s_R \mathbf{B}_R}, \\ \Phi^* &= \frac{\mathbf{B}_L s_L \mathbf{F}_R - \mathbf{B}_R s_R \mathbf{F}_L}{C_R s_L \mathbf{B}_L - C_L s_R \mathbf{B}_R}, \end{aligned} \quad (3.4.35)$$

где $\mathbf{F}_{L/R} = \mathbf{C}_{L/R} \Phi_{L/R} - s_{L/R} \mathbf{Q}_{L/R}$. В случае отсутствия к.фазы в $\mathbf{Q}_{L/R}$ значение потока имеет предельное значение $\Phi^* = \Phi_{R/L}$ соответственно. Сравнивая собственные значения (3.1.18) и (3.4.27), можно получить, что ограничение на шаг по времени на рассматриваемой стадии слабее, чем на первой стадии в случае $\rho_1 / \rho_2 < (1 + \alpha_2) / \alpha_2$, что справедливо для газов и твердых частиц в неэкстремальных условиях.

2.7 Интегрирование локальных источников

Полученное решение \mathbf{q}^{n+1} далее используется как начальные данные для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих межфазное взаимодействие, а также массообмен \mathbf{S}_m , включая уравнения модели пиролиза пленки. 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 для одного энергетического материала, покрытого пленкой:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \alpha_1 \rho_{1,j} \\ z_j \\ \alpha_{2,j} \rho_{2,j}^0 \\ \alpha_{2,j} \rho_{2,j}^0 u_{2,1} \\ \alpha_{2,j} \rho_{2,j}^0 u_{2,2} \\ \vdots \\ \alpha_1 \rho_1 u_{1,1} \\ \alpha_1 \rho_1 u_{1,2} \\ \alpha_1 \rho_{1,N+1} \\ \alpha_1 \rho_1 E_1 \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{m}_j \\ U / e_{1,j} \\ -\dot{m}_j \\ \mathbf{f}_{1,j} - \dot{m}_j \mathbf{u}_{2,1} \\ \mathbf{f}_{2,j} - \dot{m}_j \mathbf{u}_{2,2} \\ \vdots \\ \sum_j (\dot{m}_j u_{2,1} - \mathbf{f}_{1,j}) \\ \sum_j (\dot{m}_j u_{2,1} - \mathbf{f}_{1,j}) \\ \sum_j \dot{m}_j (Q_{chem,j} + 0.5(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)^2) + \mathbf{f}(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \\ g \end{pmatrix} \quad (3.5.1)$$

Система обыкновенных дифференциальных уравнений (3.5.1) с использованием методов Гира, которые являются подклассом линейных многошаговых методов, основанных на разностных формулах дифференцирования назад. Данные методы реализованы в программе DLSODE (Double Livermore Solver for Ordinary Differential Equations) [54]. Интегратор DLSODE обладает широким функционалом и позволяет использовать методы Гира с порядком интегрирования вплоть до 5-го, однако, так как используемые в газодинамическом модуле схемы интегрирования по времени обладают вторым порядком аппроксимации, работа интегратора также ограничена вторым порядком. DLSODE способен автоматически осуществлять дробление внешнего шага интегрирования (Δt) для ведения устойчивого счета, а также заменять интегрирование линейной экстраполяцией в случае, если модуль градиента переменной мал.

2.8 Особенности программной реализации

Рассматриваемый программный комплекс предназначен для проведения предсказательного моделирования многокомпонентных двухфазных течений

газа с твердыми частицами при наличии подвижных твердых тел. При программной реализации вычислительного комплекса использовались языки программирования C++ и Fortran. Программный комплекс является параллельным и используется для расчетов на высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных системах как под управлением некоторых операционных систем семейства Unix, так и Windows. Параллелизм программного комплекса основывается на методе декомпозиции расчетной области с использованием модели программирования на распределенной памяти. Для обменов данными и коммуникации между процессорами применяется получивший широкое распространение и фактически являющийся стандартным интерфейс MPI (Message Passing Interface) [55]. Каждому MPI-процессу передается часть сетки, описывающей подобласть расчетной области. В расчетах используется многоблочные неструктурированные сетки, состоящие из четырехугольных элементов и записанные в формате CGNS [56]. Декомпозиция расчетной области производится с использованием библиотеки PARMETIS [57].

Программный комплекс может быть логически разделен на три части: служебный модуль, модуль расчета локального взаимодействия, а также служебный модуль [58], реализующий вспомогательные функции, связанные с управлением памятью, вводом и выводом информации о конфигурации расчета и полученного численного решения, обработкой сетки, сбором статистики счета и т.д. Схематически работа служебного модуля, с работы которого начинается счет, представлена на рисунке 3. Для запуска расчета необходимо наличие конфигурационного файла расчета config, файла расчетной сетки geom.cgns и базы данных, содержащей информацию об используемых энергетических материалах, powders.dat. При возобновлении расчета также используются дополнительные файлы checkpoint-link и solution.chk указывающие выбранный шаг и соответственно начальные данные в расчетной области. Конфигурационный файл config записан в формате JSON [59]. Обязательными секциями являются task – конфигурация и

основные параметры расчета, такие как название задачи, величина шага по времени Δt ; conditions – параметры термодинамических зависимостей; modules – количество и расположение энергетических материалов в расчетной области. База данных powders.dat содержит не изменяемые в расчете параметры, связанные с геометрическими и термодинамическими характеристиками ЭМ.

В структуре данных, связанной с каждой расчетной ячейкой, хранится вся информация, необходимая для проведения расчета. Структура разделена на три части. В первой части хранятся сведения о геометрии ячейки – координаты ее центра, объем, координаты центров граней и т.д. Во второй части содержится информация, касающаяся непосредственно расчетной сетки – индексы соседей ячейки по каждой грани в случае, если грань является внутренней, или тип граничных условий на грани, если грань внешняя. Также в данной части хранится идентификатор процессора, на котором находится ячейка. Третья часть структуры данных содержит вектор данных в ячейке.

Решатель состоит из нескольких процедур, последовательно вызываемых для поиска решения на каждом временном шаге и реализующих численный метод §2.5 – 2.7. На каждом расчетном шаге вычисления проводятся согласно схеме, представленной на рис. 4.

Файлы решения, используемые программным комплексом, имеют бинарный формат и разделены на две части. Основная часть файла содержит распределение параметров в расчетной области, а в заголовке записывается информация о том, какому расчетному шагу и какому моменту по времени соответствует данный файл решения, а также с каким шагом по времени Δt выполнялся расчет до записи данного файла.

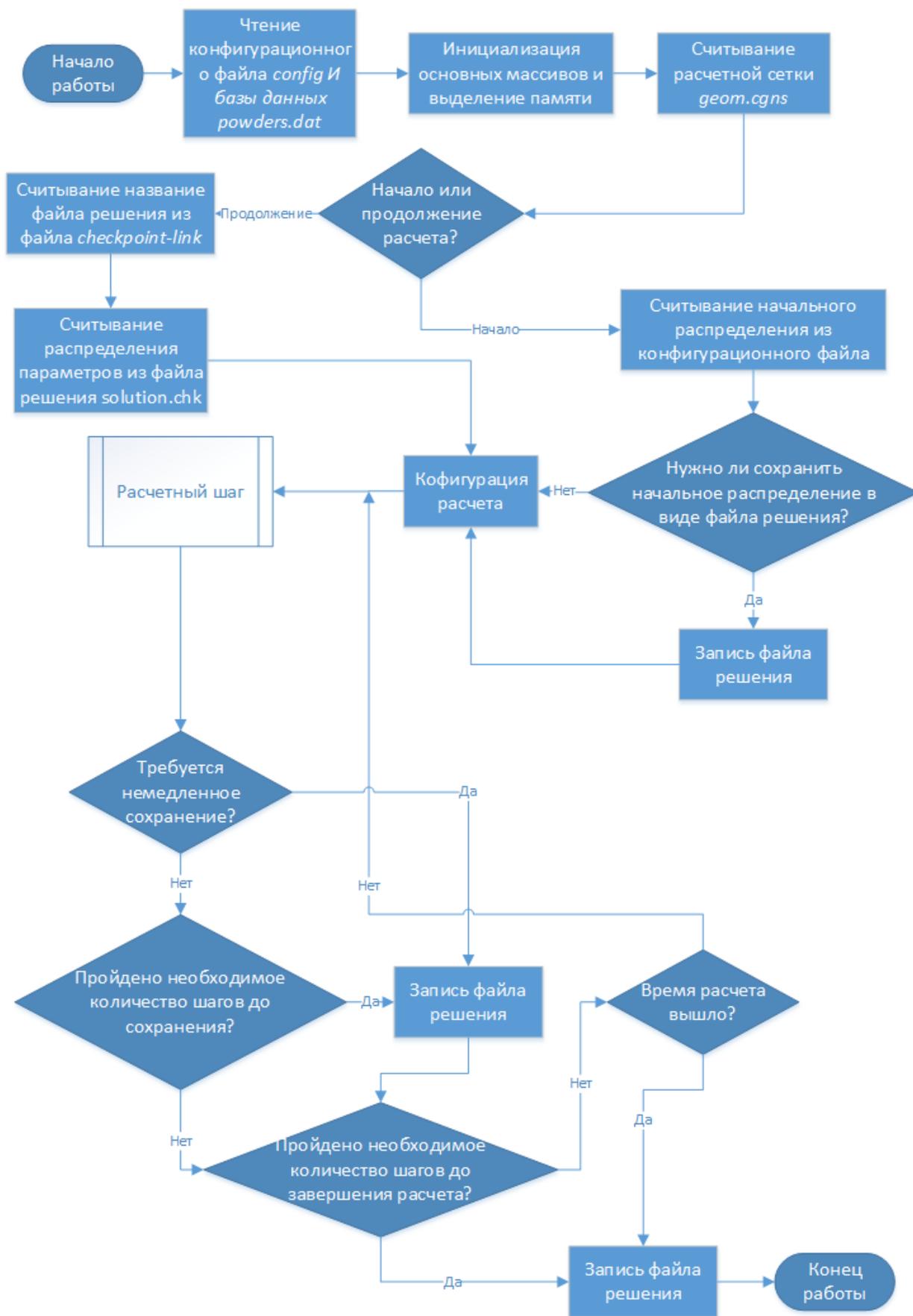


Рисунок 3 - Схема работы служебного модуля

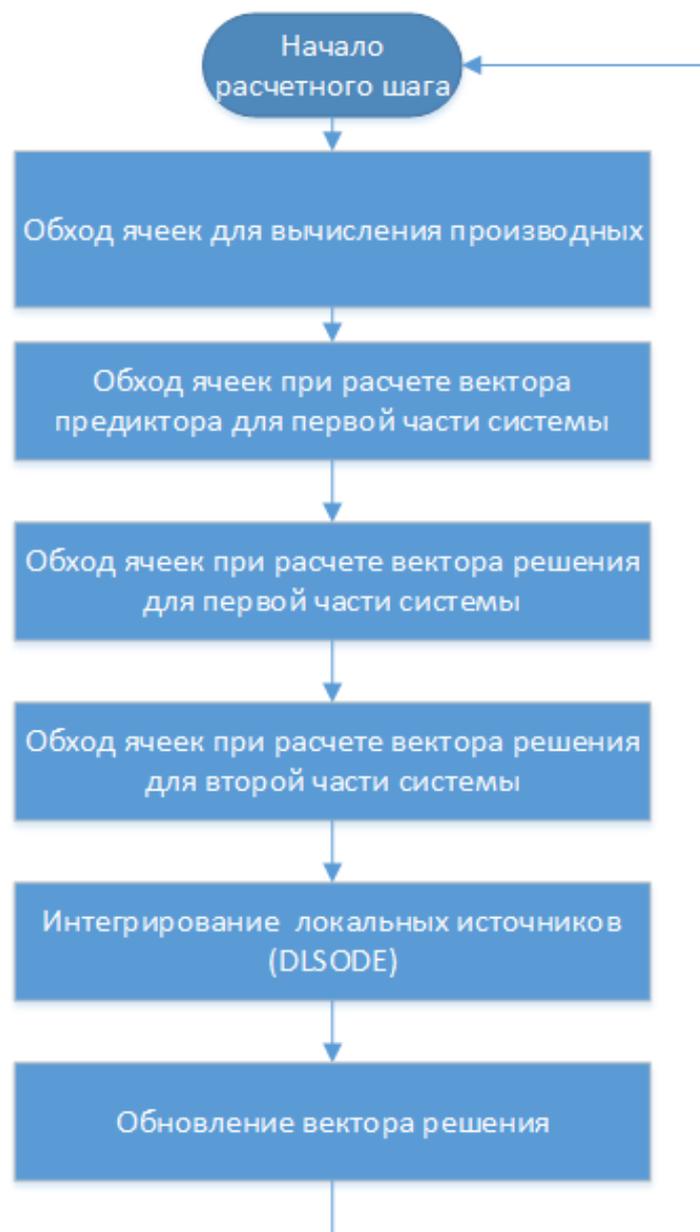


Рисунок 4 - Схема расчетного шага алгоритма

Глава 3 Тестирование расчетной методики

Описанный выше метод верифицировался на ряде одномерных задач. В рассмотренных задачах использовалась аппроксимация межгранулярного давления с параметрами $\beta_* = 0.58$, $k = 0.57$, $B = 15$, ($[B] = \text{Атм}$)

Первый тест рассматривает разлет сжатого до закритической объемной доли слоя частиц в вакуум. Второй тест демонстрирует эффект градиентной катастрофы решения и образования последовательности волн компактирования при прохождении волны компактирования по слою частиц с неоднородным распределением объемной доли. В третьем тесте численно исследуется разлет предварительно сжатого пристеночного слоя частиц, сопровождающийся образованием характерных структур (отслоение частиц от стенки) и многократным отражением волн компактирования и раскомпактирования от границ отошедшего от стенки слоя частиц. В четвертом тесте мы проверяем способность численного метода сохранять движение смеси частиц и газа с постоянной скоростью (the property of well-balancing в английской литературе). В пятом тесте проводится сравнение численного и аналитического решений в двухфазной задаче распада разрыва. В шестом тесте проводится верификация кинетики горения энергетического материала с пленочным покрытием и без него в условиях постоянного объема.

3.1 Разлет сжатого слоя частиц в вакуум

Рассматривается разлет частиц с объемной долей выше критической в область без частиц. В таблице 1 содержатся начальные данные для этой задачи. Начальное положение границы слоя частиц $x = 0.05$ м. В расчете использовалась равномерная сетка в 400 ячеек.

Таблица 1 – Начальные параметры в задаче о разлете слоя частиц в вакуум

	$x < 0.05$	$x > 0.05$
α_2	0.65	0
u_2 , км/с	0.0	0

На рис.5 представлены результаты численных расчетов по методу Годунова и HLL второго порядка точности. В этой задаче налево от разрыва распространяется волна раскомпактирования. За волной раскомпактирования объемная доля конденсированной фазы снижается в точности до критического значения α_2^* , и межгранулярное давление при этом в конденсированной фазе зануляется. Расположенная правее граница плотной упаковки является лагранжевой границей, отделяющей область частиц от вакуума. Волны компактирования не образуются. Раскомпактировавшиеся частицы продолжают движение с постоянной скоростью, равной примерно 0.14 км/с. Можно заметить, что в расчете по приближенному методу HLL на границе конденсированной фазы и области без частиц скорость конденсированной фазы описывается менее точно, чем в схеме Годунова.

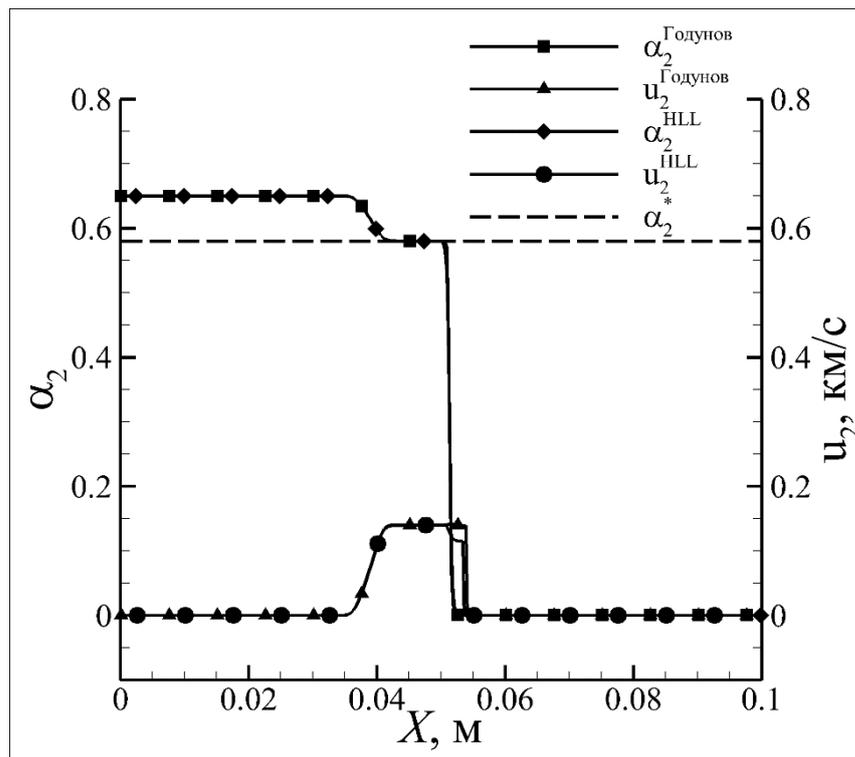


Рисунок 5 - Распределение параметров в задаче о разлете в вакуум на момент времени $t=0.0096\text{мс}$; метод Годунова с точным решением задачи Римана и приближенным HLL. Схема второго порядка точности.

3.2 Распространение волны компактирования по неоднородно распределенным частицам (волновой поезд)

В газовой динамике известна задача Шу-Ошера [60], в которой ударная волна распространяется по области с неоднородной плотностью газа. В рассматриваемой задаче волна компактирования распространяется по засыпке частиц с неоднородной объемной долей. В таблице 2 приведены начальные данные для этой задачи. Волна компактирования в начальный момент расположена в точке $x=0.05$. Перед волной объемная доля изменяется по периодическому закону (второй столбец табл. 2) при переходе через которую параметры течения меняются со значений $\alpha_2 = 0.3$, $u_2 = 0$ до значений из первого столбца табл. 2. На левой границе расчетной области используется условие заданного расхода конденсированной фазы, на правой производится интерполяция параметров из расчетной области. В расчете использовалась равномерная сетка в 400 ячеек.

Таблица 2 - Начальные параметры в аналоге задачи Шу-Ошера

	$x < 0.05$	$x > 0.05$
α_2	0.65	$0.3 + 0.1\sin(1000(x-0.05))$
u_2 , км/с	0.320422579	0.0

Результаты численных расчетов по методу Годунова и HLL второго порядка точности на момент времени $t = 0.036$ мс представлены на рис.6. Волна компактирования, распространяясь направо, начинает взаимодействовать с неравномерно распределенными частицами. За фронтом волны распределение скорости и объемной доли приобретают пилообразный характер. Результаты по схемам Годунова и HLL показывают слабо отличающиеся решения. Наиболее удаленное от начального разрыва возмущение имеет меньшую амплитуду, так как начальное значение объемной доли справа соответствует нулевому значению синуса. 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 последовательностидвигающихся друг за другом волн компактирования (волновой поезд).

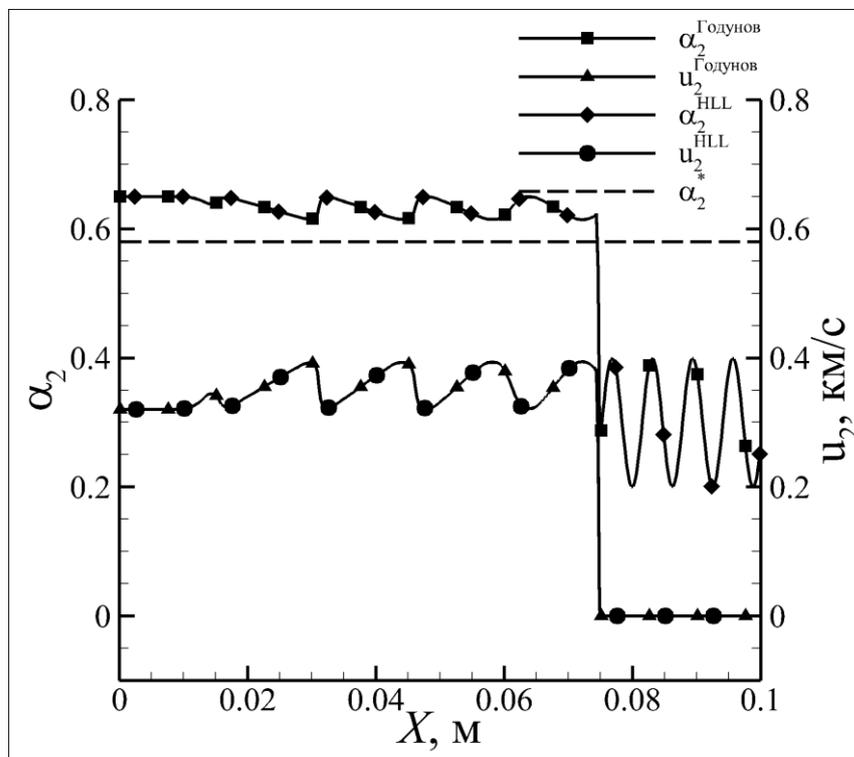


Рисунок 6 - Распределение параметров частиц в задаче о волновом поезде в момент времени $t=0.036$ мс; метод Годунова с точным решением задачи Римана и приближенным HLL. Схема второго порядка точности.

3.3 Разлет пристеночного слоя частиц

Рассматривается разгрузка тонкого слоя частиц размером 0.01 м, имеющего объемную долю выше критической и расположенного у жесткой стенки, в пространство, заполненное частицами с докритической объемной долей. В табл. 3 приведены начальные параметры задачи. На левой границе области задано условие стенки, а на правой – интерполяция первого порядка. Расчетная область имеет длину 0.1м и содержит 1000 ячеек.

Таблица 3 – Начальные параметры в задаче о разлете пристеночного слоя частиц

	$x < 0.01$	$x > 0.01$
α_2	0.65	0.4
u_2 , км/с	0.0	0

На рис. 7 приведены численные распределения на несколько последовательных моментов времени, полученные с использованием метода Годунова и метода HLL второго порядка точности. Оба метода показывают практически идентичные результаты. В результате распада разрыва по сжатой дисперсной фазе влево от разрыва распространяется волна раскомпактирования, в которой объемная доля частиц изменяется от начального значения до величины α_2^1 , несколько выше критического уровня объемной доли (рис. 7а). Направо при этом распространяется волна компактирования.

После отражения от стенки первичной волны раскомпактирования формируется вторичная (отраженная) волна раскомпактирования, в которой объемная доля изменяется от α_2^1 до критического значения α_2^* (рис. 7б). Видно, что в области между вторичной волной раскомпактирования и стенкой формируется распределение параметров среды, которое характеризуется постоянным по пространству и убывающим по времени значением объемной доли и линейным профилем скорости частиц (рис. 7в).

Чтобы описать эту структуру, рассмотрим частное решение уравнений (3.1.11) вида:

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= \alpha_2(t), \\ u_2 &= k(t)x. \end{aligned} \tag{3.7.1}$$

Нетрудно убедиться, что такое решение существует, если:

$$\begin{cases} k(t) = 1/(t - C_1) \\ \alpha_2(t) = C_2/(C_1 - t) \end{cases} \tag{3.7.2}$$

где C_1 и C_2 - произвольные константы интегрирования.

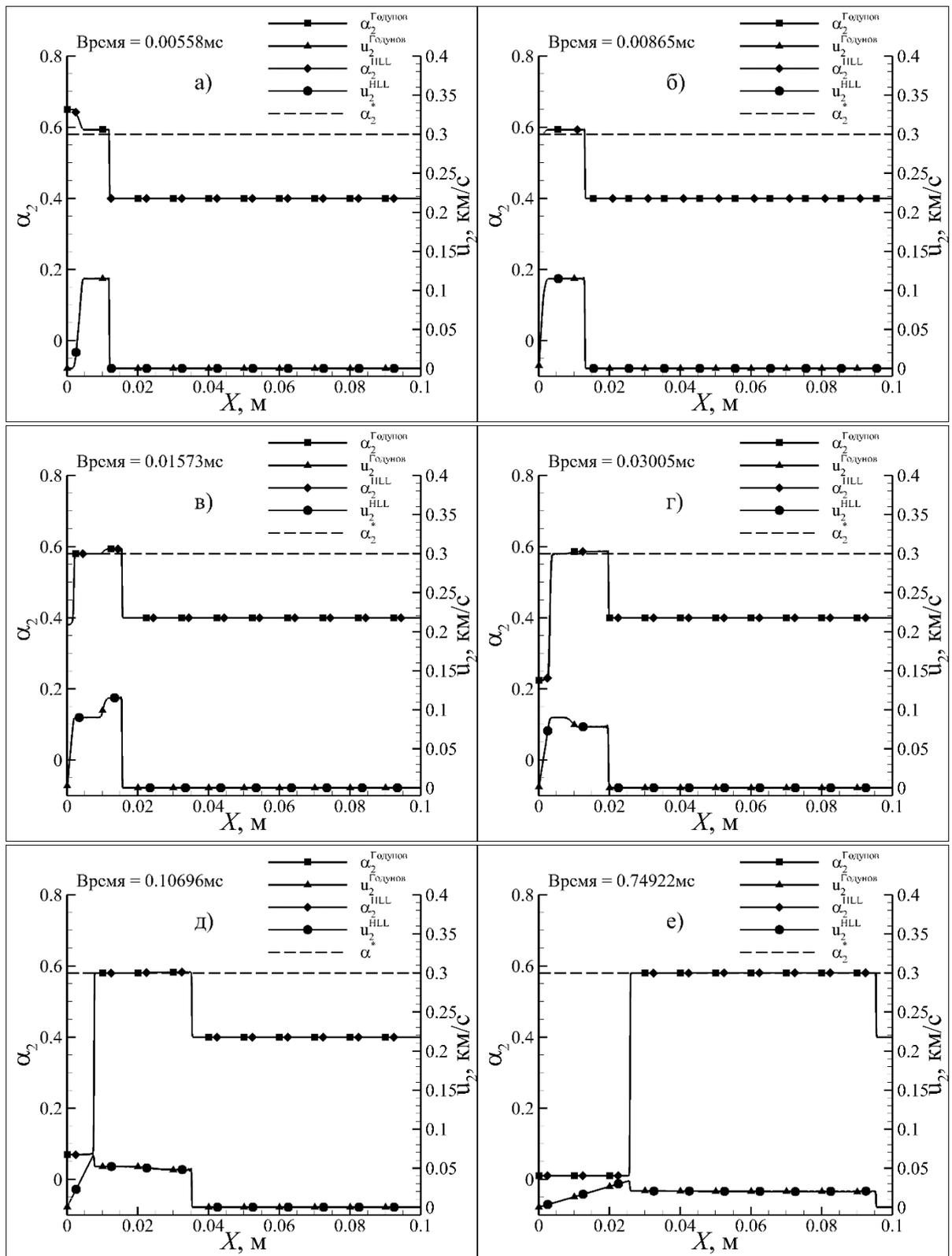


Рисунок 7 – Разлет пристеночного сжатого слоя частиц. а) формирование волны раскомпактирования, б) начало отражения волны раскомпактирования от стенки; в) формирование пристеночной области разреженных частиц с линейным профилем скорости; г) волны компактирования после отражения от правой границы слоя частиц; д) волна компактирования низкой амплитуды; е) формирование области отрыва слоя частиц от стенки

Рассматривая последовательные моменты времени t_1 , t_2 и соответствующие значения объемной доли α_2^1 и α_2^2 , константы можно выразить следующим образом:

$$C_1 = \frac{(\alpha_2^1 t_1 - \alpha_2^2 t_2)}{\alpha_2^1 - \alpha_2^2}, \quad C_2 = \alpha_2^1 (C_1 - t_1). \quad (3.7.3)$$

Применим полученное решение (3.7.2) и (3.7.3) для описания пристеночной области рис.7. Выберем моменты времени $t_1 = 0.01573$, $t_2 = 0.03005$ мс и соответствующие значения объемной доли $\alpha_2^1 = 0.37933$, $\alpha_2^2 = 0.22255$ полученные в расчете, тогда значения коэффициентов составляют $C_1 = -0.00461$ и $C_2 = -0.00772$. Решение (3.7.1) с этими значениями коэффициентов рис.8 согласуется с численным решением и в последующие моменты времени. Время снижения объемной доли в 100 раз от значения 0.5 до 0.005 составляет при этом около 1.5257 мс, что можно считать временем отрыва частиц от стенки и формированием вакуумной пристеночной области.

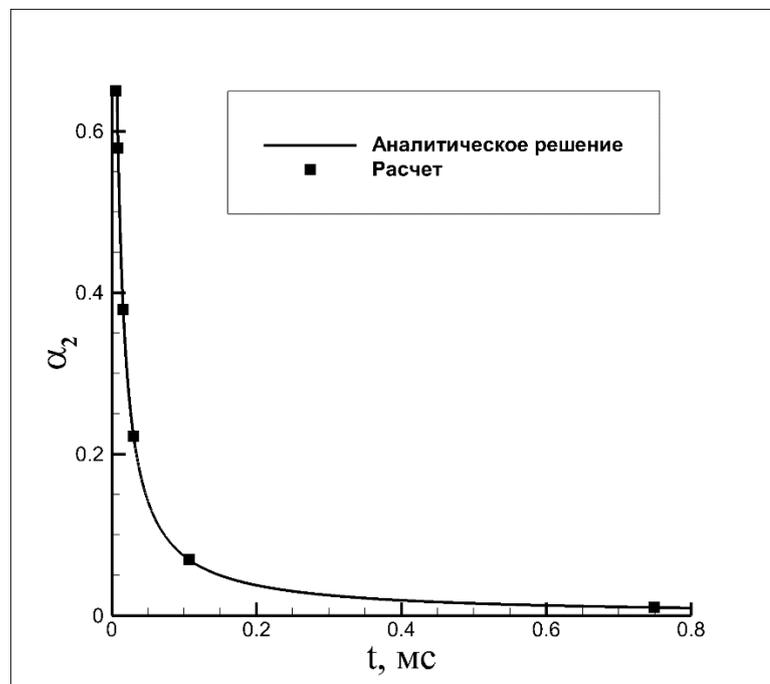


Рисунок 8 - решение (3.7.1) и численное решение в моменты времени, соответствующие рисунку 7.

После взаимодействия вторичной волны раскомпактирования с

первичной волной сжатия, движущейся направо по слою разреженных частиц, возникает и начинает движение в обратную сторону вторичная волна компактирования (рис. 7г). Достигая левой границы слоя, она отражается волной раскомпактирования. Таким образом, отход слоя частиц от стенки сопровождается квазипериодическим волновым процессом. Он состоит из последовательности волн компактирования, убывающей амплитуды движущихся налево, и волн раскомпактирования, движущихся по слою направо. В результате этого волнового процесса происходит перераспределение импульса, объемная доля в слое постепенно приближается к критическому значению, а скорость слоя уменьшается. В пределе объемная доля в слое достигает критического значения, и он останавливается на некотором расстоянии от стенки.

3.4 Конвективный перенос плоского слоя частиц в газе

Рассматривается движение засыпки частиц с докритической объемной долей в газе. Газ и частицы движутся с одинаковой постоянной скоростью в направлении области без частиц. Давление газа в области постоянно, а плотность претерпевает разрыв на границе слоя частиц. Начальные данные задачи приведены в таблице 4. Начальное положение границы слоя соответствует $x = 0.05$ м. В расчете используется равномерная сетка из 400 ячеек. На левой границе заданы плотность, скорость и давление газа, а также объемная доля и скорость частиц. На правой границе – условие интерполяции.

Таблица 4 - Начальные параметры в задаче о переносе слоя частиц

	$0 < x < 0.05$	$0.05 < x < 0.1$
α_2	0.5	0
u_2 , км/с	0.2	0
ρ_1 , кг/м ³	3.6	2.6
u_1 , км/с	0.2	0.2
p , МПа	0.3	0.3

Результаты расчетов приведены на рисунке 9. Здесь приведены численные решения на момент времени $t = 0.1325$ мс. Область слоя частиц к этому моменту составляет $[0.17, 0.87]$ Из-за численной диффузии граница области частиц размывается на распределении объемной доли. Ширина размывания больше, чем для расчета без газа. При этом скорость частиц сохраняет постоянное значение. Нулевые значения скорости на графике соответствуют точкам с нулевой объемной долей.

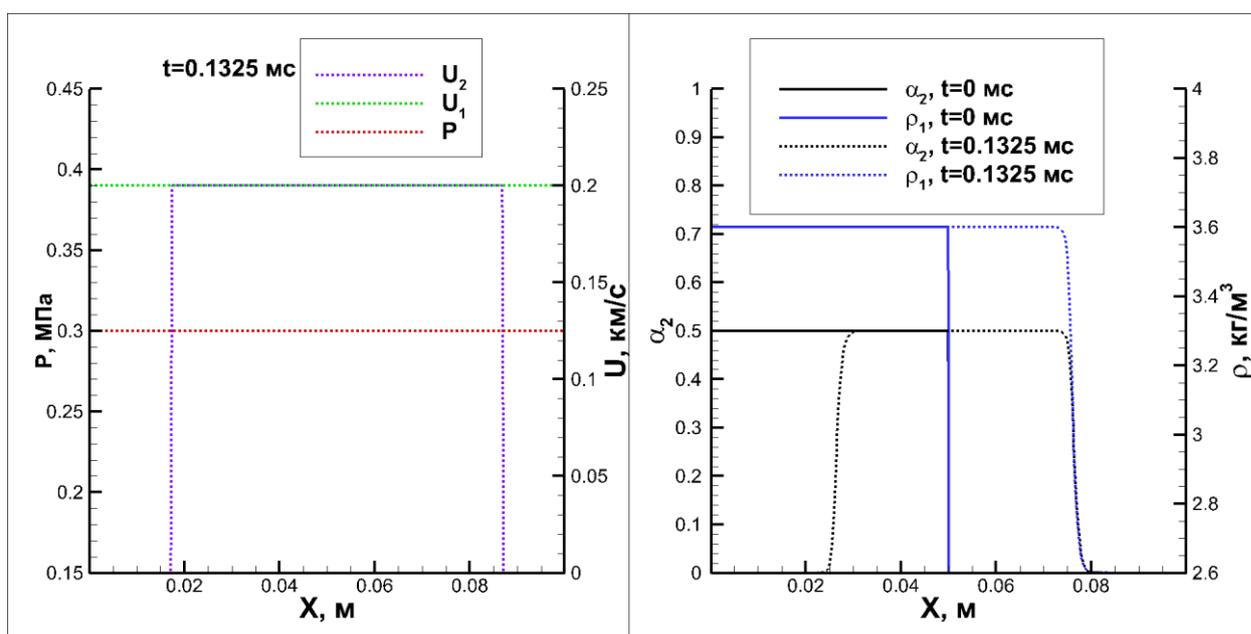


Рисунок 9 - Распределение параметров в расчетной области в момент времени $t=0.1325$ мс; метод Годунова с приближенным решением задачи Римана типа HLL.

3.5 Задача о распаде произвольного разрыва в газе с частицами

Данный тест приведен для сравнения с референсным решением, так как для рассматриваемой системы уравнений (3.1.3) точных решений в литературе нет. В [40] рассматриваются течения газа в областях с заданным и постоянным по времени распределением объемной доли. Эти течения фактически описываются двухфазными уравнениями, в которых фаза частиц неподвижна. В качестве референсного решения был выбран тест «С», начальные данные для которого приводятся в таблице 5, а точное решение приведено на рисунке 10 линиями без символов. Получающаяся в результате распада разрыва волновая конфигурация в этом тесте является регулярной, т.е.

образующиеся ударная волна и волна разрежения не пересекаются с разрывом пористости. В модели (3.1.3) перепад давления приводит к появлению скорости к-фазы. Для того чтобы сравнить решение, полученное по модели (3.1.3) с референсным решением, рассматриваются твердотельные плотности частиц 10^2 , 10^3 , 10^5 кг/м³, так как более плотные частицы разгоняются до меньшей скорости. При высокой плотности частиц они фактически остаются на месте, поэтому полученное численное решение должно совпадать с точным референсным. В расчетах рассматривалась область длиной 2м, содержащая 800 ячеек.

Таблица 5 – Начальные параметры в задаче о распаде произвольного разрыва

	$0 < x < 0.8$	$x > 0.8$
α_2	0.1	0
u_2 , км/с	0.0	0
ρ_1 , кг/м ³	3.6	3.23885
u_1 , км/с	0.1	0.153785
p , МПа	0.3	0.2

На рисунке 10 результаты численных расчетов по предложенному методу представлены линиями с маркерами. Решения полученные при различных плотностях частиц близки друг к другу. При увеличении плотности частиц значение скорости газа между волной разрежения и разрывом пористости увеличивается и приближается к значению референсного решения. Скорости частиц при этом соответственно падают. При плотности частиц $\rho_2=10^5$ кг/м³ скорости частиц в расчете составляют $\sim 10^{-6}$ км/с.

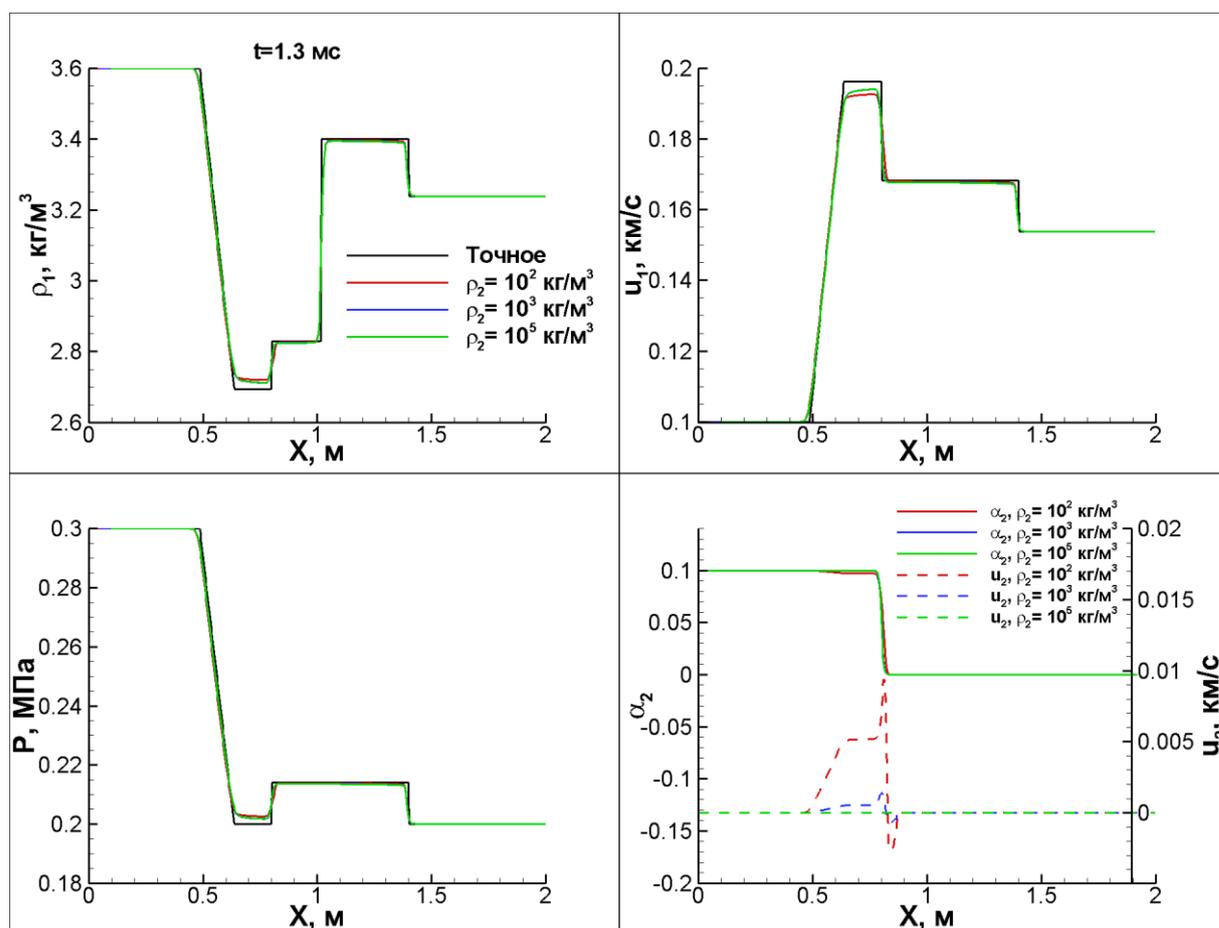


Рисунок 10 - Параметры в тесте С при варьировании плотности частиц. Метод HLL повышенного порядка точности. Сравнение с точным решением для неподвижных частиц.

3.6 Горение в замкнутом объеме

Опыты по исследованию горения образца насыпной плотности из зерен, покрытых пленкой ПВБ, проводились в цилиндрической камере номинальным объемом 95 см³ и диаметром 38 мм. Для генерации газа использовался семиканальный порох 5/7 насыпной плотности, зерна покрывались пленкой ПВБ, масса которой составляла 4.3%. Для сравнения проводился опыт с порохом из зерен без покрытия пленкой. Схема установки приведена на рисунке 11. Исследуемая засыпка массой 5.1 г помещалась в стакан из плексигласа внутренним диаметром 19 мм и высотой 56 мм. Горение инициировалось с помощью воспламенителя, состоящего из смеси 1 г измельченного дымного пороха и 2 г бензотрифуроксана (БТФ).

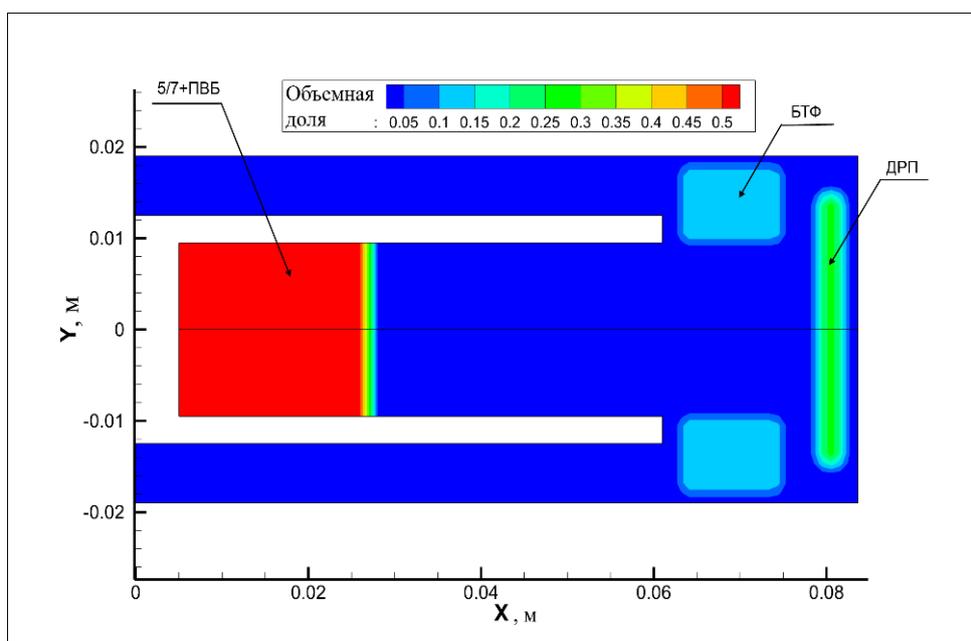


Рисунок 11 - Схема установки постоянного объема.

Воспламенитель сгорал приблизительно за 2 мс и создавал в объеме давление около 45 МПа. Условия опытов приведены в таблице 6. Результаты опытов в виде диаграмм давления, полученных с помощью высокочастотного пьезоэлектрического датчика марки Кистлер, приведены на рис. 12. Хорошо видно, что 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).

Таблица 6 - Условия опытов в замкнутом объеме с образцами насыпной плотности

Опыт	Зерно	Высота засыпки, мм	Плотность образца, г/см ³	Свободный объем камеры, см ³
1	5/7	16	0.9	82.1
2	5/7 + 4.3% ПВБ	19	0.81	80.8

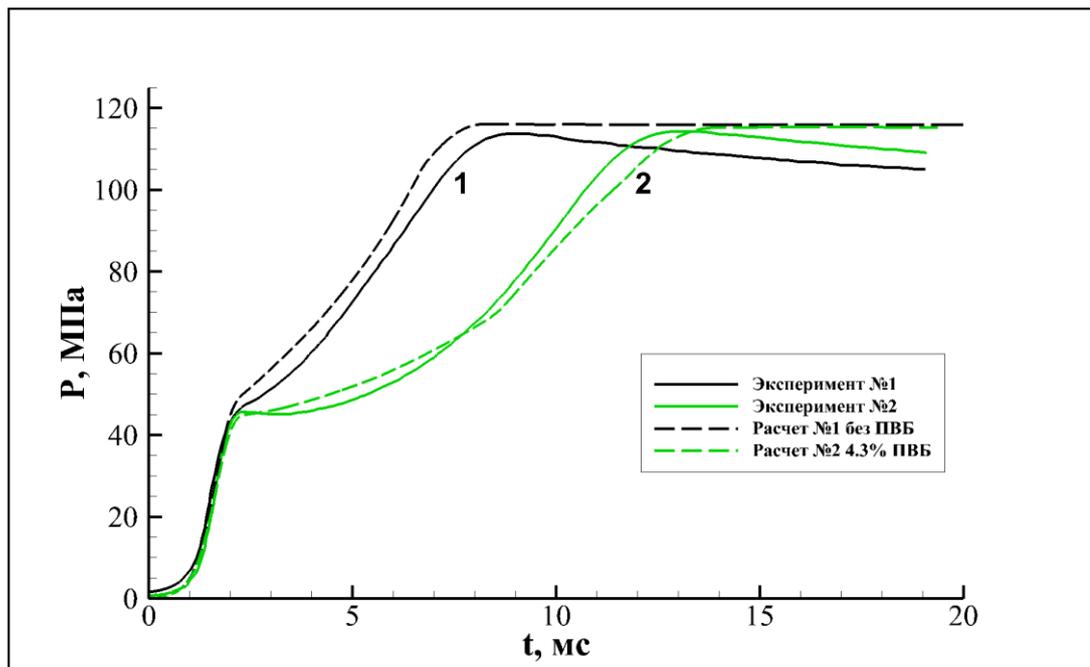


Рисунок 12 – Экспериментальные (сплошные линии) и расчетные (пунктирные линии) диаграммы давления в замкнутом объеме при горении образцов насыпной плотности из пероксилинового пороха 5/7 без ПВБ (1) и из пороха 5/7 с 4.3% ПВБ (2).

Динамика давления в замкнутом объеме, полученная в расчетах, представлена на рис. 12 в виде пунктирных линий. Сопоставляя результаты расчетов с экспериментом, можно отметить хорошее согласие по форме и максимальному темпу роста давления как для опыта без ПВБ, так и для опыта с пленкой полимера. Также имеется согласие относительно влияния пленки на начало горения образца. Отличие в поведении давления после достижения максимума вызвано тем, что в расчетах отсутствует учет теплопотерь в стенки.

Глава 4 Численное моделирование горения ВЗКГ

4.1 Постановка задачи

Опыты по исследованию горения блоков энергетического материала высокой плотности из зерен, покрытых пленкой ПВБ, проводились в установке, состоящей из двух соосных цилиндрических секций (рис. 13) [32,33]. Внутренний диаметр секции, в которую помещался исследуемый ЭМ составлял 19мм, а длина – 120мм.

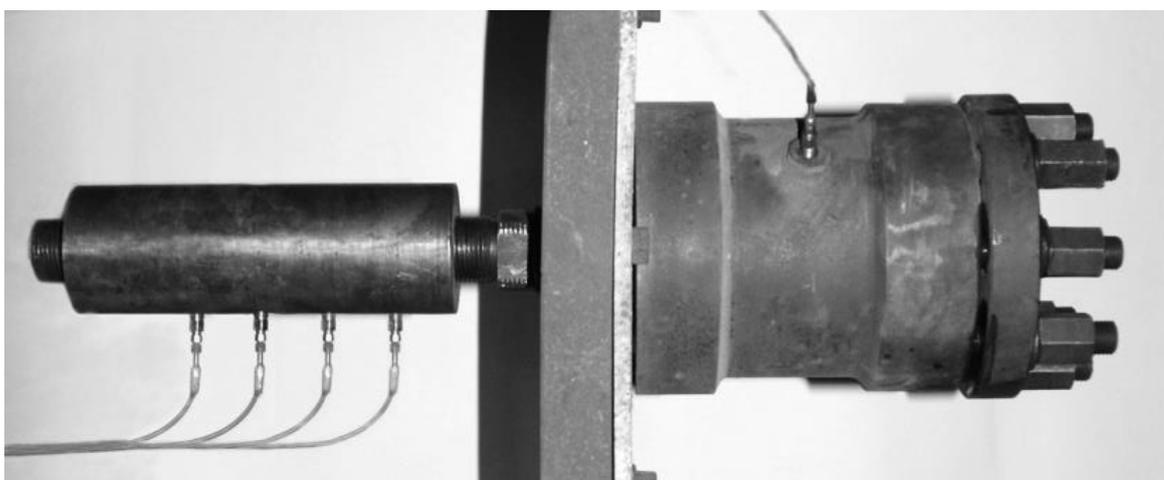


Рисунок 13 – Экспериментальная установка

В дожигательной секции диаметром 60мм и длиной 100мм располагался воспламенитель, а также имелось отверстие диаметром 3мм, находившееся на оси симметрии установки. Вдоль оболочки размещались 4 датчика давления (D4-D1) на расстоянии 25, 47, 67, 87мм от закрытого дна канала (совпадает с 0 по оси X на рис. 14). Еще один датчик давления (D0) размещался в дожигательной секции.

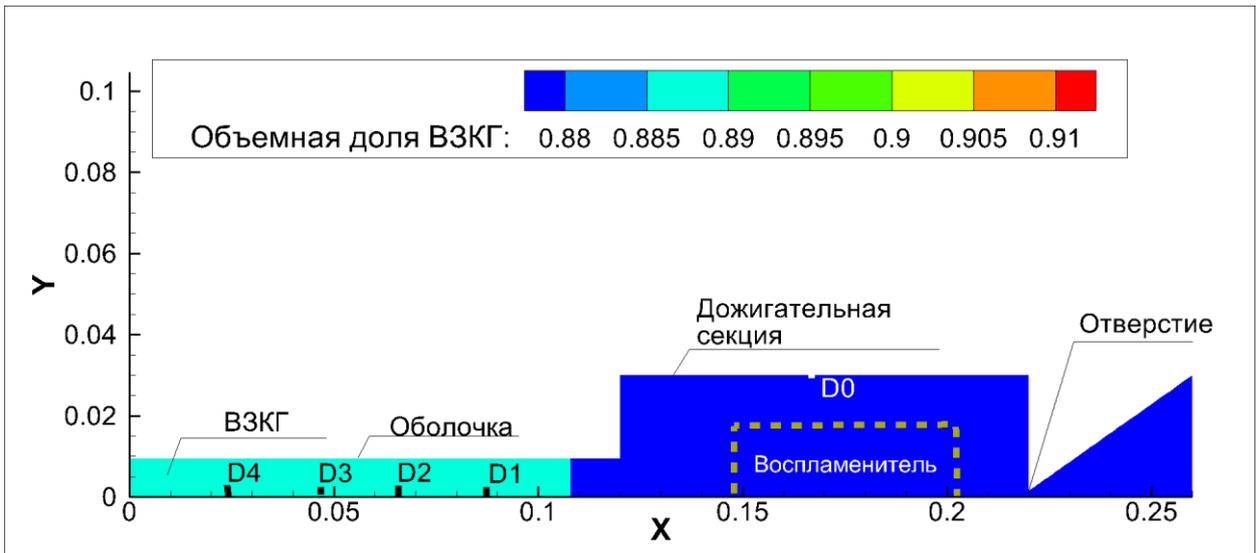


Рисунок 14 – Схема экспериментальной установки.

Энергетический материал был изготовлен из зерен пироксилинового пороха 5/7 (диаметр зерна 3.3 мм, длина 4.7 мм, 7 каналов диаметром 0.2 мм, $\chi_1=0.725$, $\lambda_1=0.226$, $\mu_1=-0.0477$, $\chi_2=0.629$, $\lambda_2=-1.082$, $\mu_2=0$, $z_k=1.4618$) покрытых пленкой поливинилбутираля (ПВБ). Массовая доля пленки составляла 4.5% массы ЭМ. Зерна прессовались порционно непосредственно в канал оболочки до достижения образцом длины, указанной в таблице 7 [32,33]. Изменение плотности образцов также исследовалось при помощи пресса. При заданной твердотельной плотности энергетического материала и пленки полученная зависимость длины от давления может быть преобразована в кривую прессования в терминах давления и пористости (рис. 15). Скорость послойного горения пироксилинового пороха задавалась в виде $U=U_0P$, $U_0=0.9$.

Таблица 7 - Параметры ингибированного ЭМ

Параметры ЭМ №	Масса, г	Длина, мм	Средняя плотность, г/см ³	Пористость	Σ_0
1(R05)	39.4	115	1.208	0.2293	0.509
2(R04)	42.7	108.5	1.388	0.1147	0.36
3(R01)	43.5	106.8	1.436	0.0838	0.307

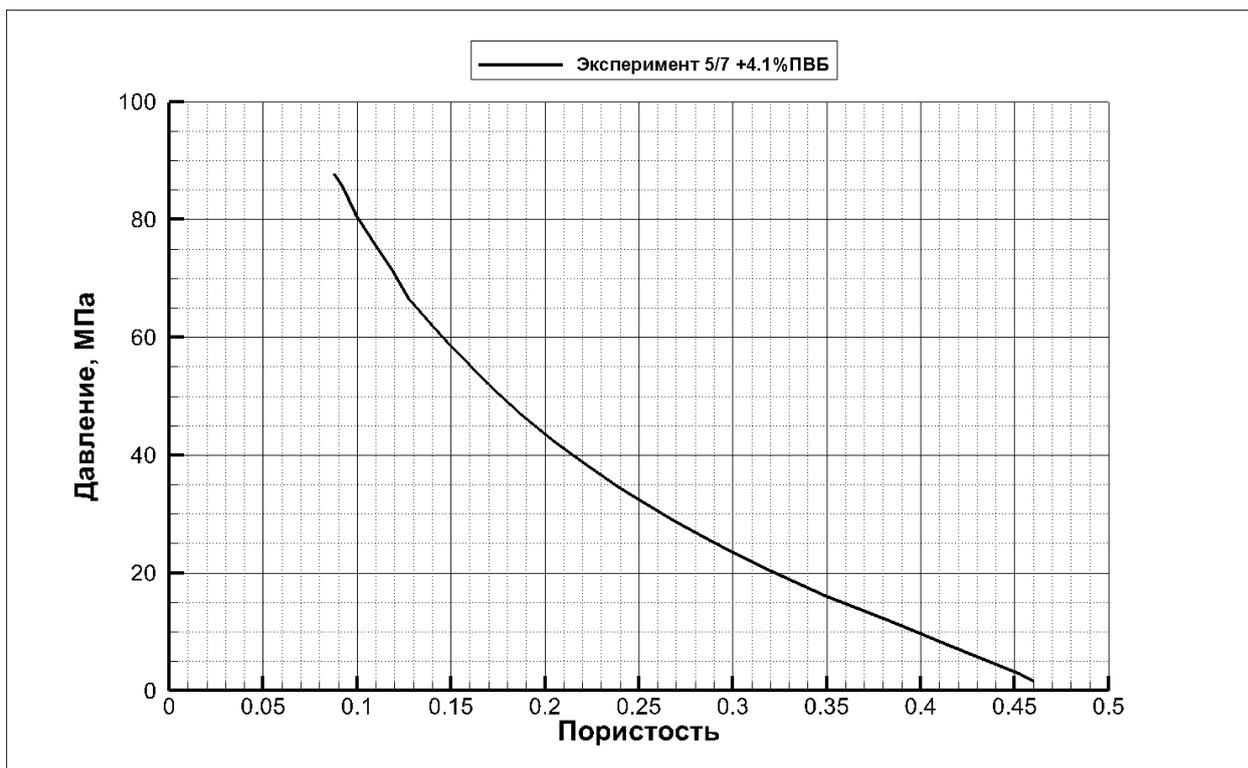


Рисунок 15 - Рассчитанное изменение объемной доли в результате прессования. Данные получены для образца с содержанием пленки 4.1%.

Воспламенитель состоял из навески дымного пороха массой 1г и 10г пироксилинового пластинчатого пороха “Сокол” с толщиной свода 0.08мм. Газы, образующиеся при сгорании воспламенителя в дожигательной секции, поступали в канал цилиндрической оболочки, а также выходили во внешнее пространство через сопло.

4.2 Результаты расчетов

В расчете использовались следующие параметры модели: толщина пленки h_0 составляла 31мкм, множитель в законе изменения поверхности при разгаре $g = 0.43$, процент пленки, пиролизующейся до начала горения вещества под ней $z_f = 0.65$. На рис. 16 приведены экспериментальные [32,33] и расчетные записи датчика D0, расположенного в дожигательной секции (пунктирная линия) и датчиков D1-D4 нумеруемых по удалению от поджигаемого торца блока на стадии прохождения процесса конвективного горения внутрь образца. В начальный момент времени в расчете

предполагается горящим весь дымный порох. Воспламенитель в расчете горит около 5мс, обеспечивая давление в дожигательной камере порядка 40МПа.

В силу высокой пористости заряда №1 волна конвективного горения быстро достигает дна оболочки. В эксперименте перепад давления между датчиками не превышает 20МПа. Прессование до данной пористости производилось при большем давлении, что позволяет предположить отсутствие значительного компактирования зерен образца. При этом в расчете и эксперименте присутствует задержка роста давления между датчиками D2-D4. В расчете, представленном на рисунке 16(а), порох 5/7 считается сферическим (т.е. площадь поверхности каналов не учитывается при расчете эффективного диаметра зерна и толщины свода горения, а в качестве коэффициентов формы используются коэффициенты формы для сферы). После начала горения основного заряда темп роста давления в этом расчете ниже, чем в эксперименте. На рисунке 16(б) приведен расчет, в котором при горении учитывается наличие каналов в порохе 5/7. Темп роста давления в этом случае в интервале 7-13мс согласуется с экспериментальными данными. Таким образом, результаты моделирования лучше согласуются с экспериментом в предположении горения основного пороха по всей поверхности зерна с учетом каналов после охвата горением (при $G=1$).

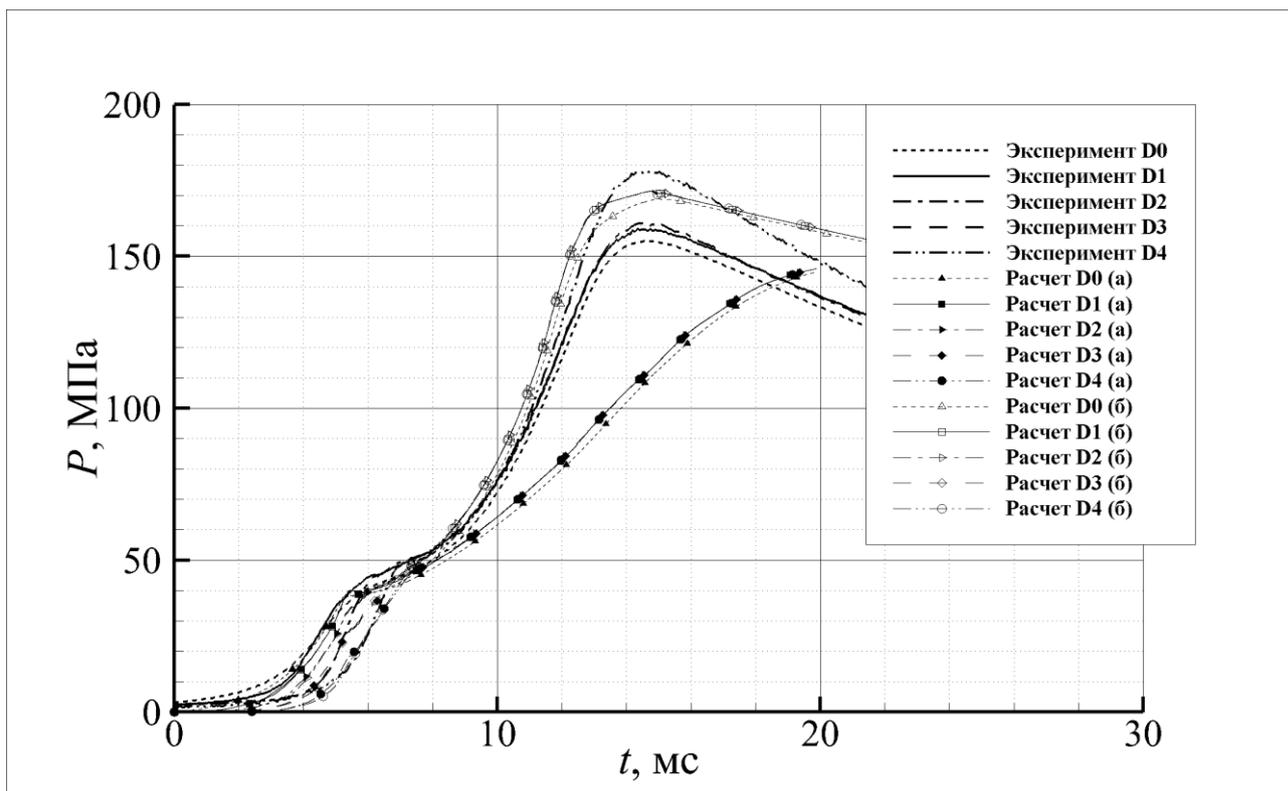


Рисунок 16 – Экспериментальные (линии без символов) и расчетные (линии с символами) диаграммы давления в 4 положениях по длине образца и в дожигательной секции в опыте по конвективному горению блочного ЭМ № 1. Форма зерен: а) сферическая, б) цилиндрическая с каналами 5/7.

В эксперименте №2 (рис. 17) [32,33] после 5мс давление на датчике D0 хотя продолжает повышаться, но значительно более низким темпом, что может свидетельствовать о начале горения части торца основного ЭМ. В расчете воспламенение торца блока наступает позже. Перепад давления внутри и на торце блока достигает 40МПа, что при заданной плотности ЭМ также не должно приводить к его компактированию. Начало пиролиза пленки ПВБ в порах происходит при давлении около 13Мпа. Стадия пиролиза пленки в порах в области датчика давления продолжается до выравнивания показания этого датчика с предыдущими датчиками. Для участка блока, соответствующего датчику D1, например, стадия пиролиза продолжается до момента времени 7.5мс. После стадии пиролиза еще около 1.5 мс длится стадия охвата остальной поверхности зерна горением (стадия разгара).

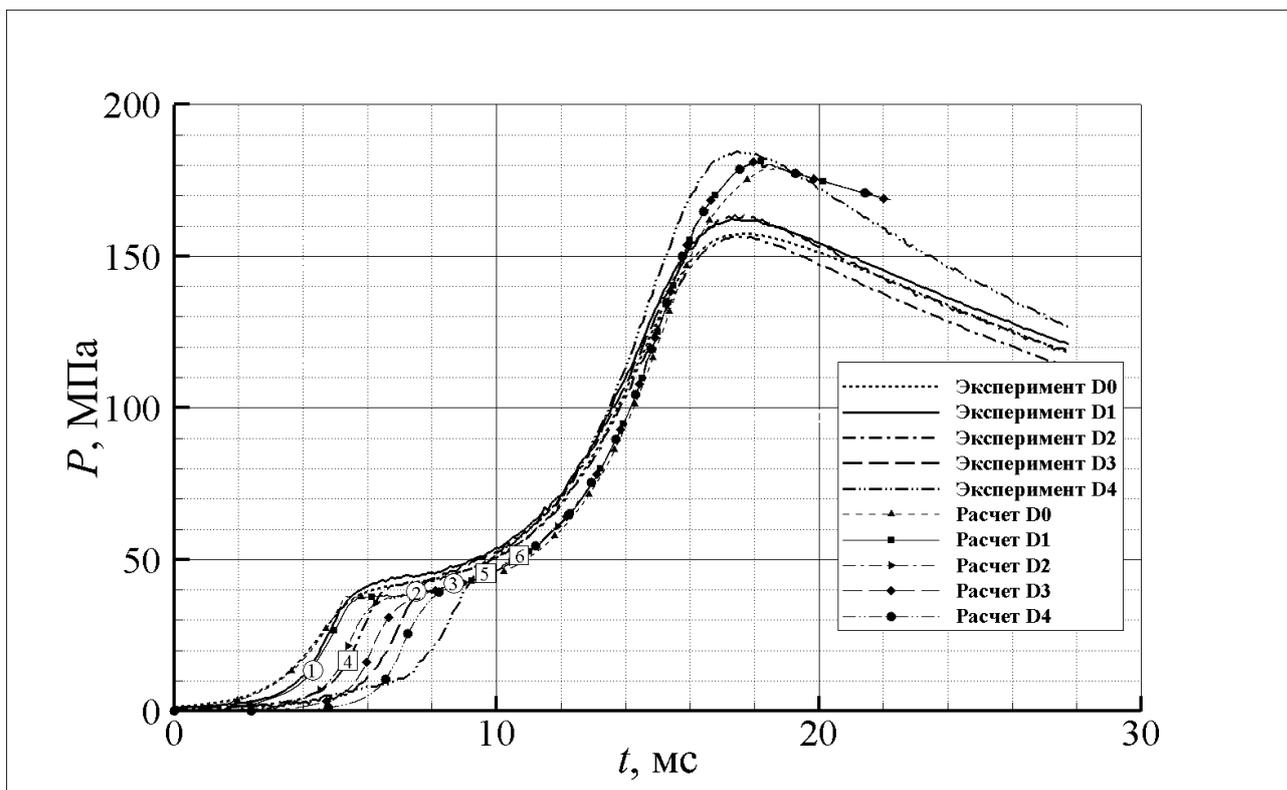


Рисунок 17 – Экспериментальные (линии без символов) и расчетные (линии с символами) диаграммы давления в 4 положениях по длине образца и в дожигательной секции в опыте по конвективному горению блочного ЭМ №2. 1, 4 – начало пиролиза пленки в порах у датчика D1 и D2 соответственно, 2, 5 – конец пиролиза пленки в порах у датчика D1 и D2 соответственно, 3, 6 – полный пиролиз пленки у датчика D1 и D2 соответственно.

Варьирование доли пленки, после пиролиза которой воспламеняется основной ЭМ, приведено на рис.18. Расчеты показывают, что задержки прохождения волны конвективного горения между датчиками слабо изменяются. При этом резко меняется темп роста давления, связанный с началом горения основного ЭМ. В расчетах также наблюдается следующий эффект: при увеличении теплового потока выравнивание давления в образце происходит быстрее, что приводит к уменьшению задержки между датчиками и уменьшению относительной скорости газовой и твердой фазы, на основе которых рассчитывается тепловой поток. Таким образом, тепловой поток в зоне пиролиза уменьшается, что замедляет пиролиз и воспламенение ЭМ. В результате, увеличение теплового потока не приводит к пиролизу всей пленки в порах. Поэтому при тепловом потоке, соответствующем экспериментальной задержке прохождения датчиков давления, производилось изменение

величины z_f .

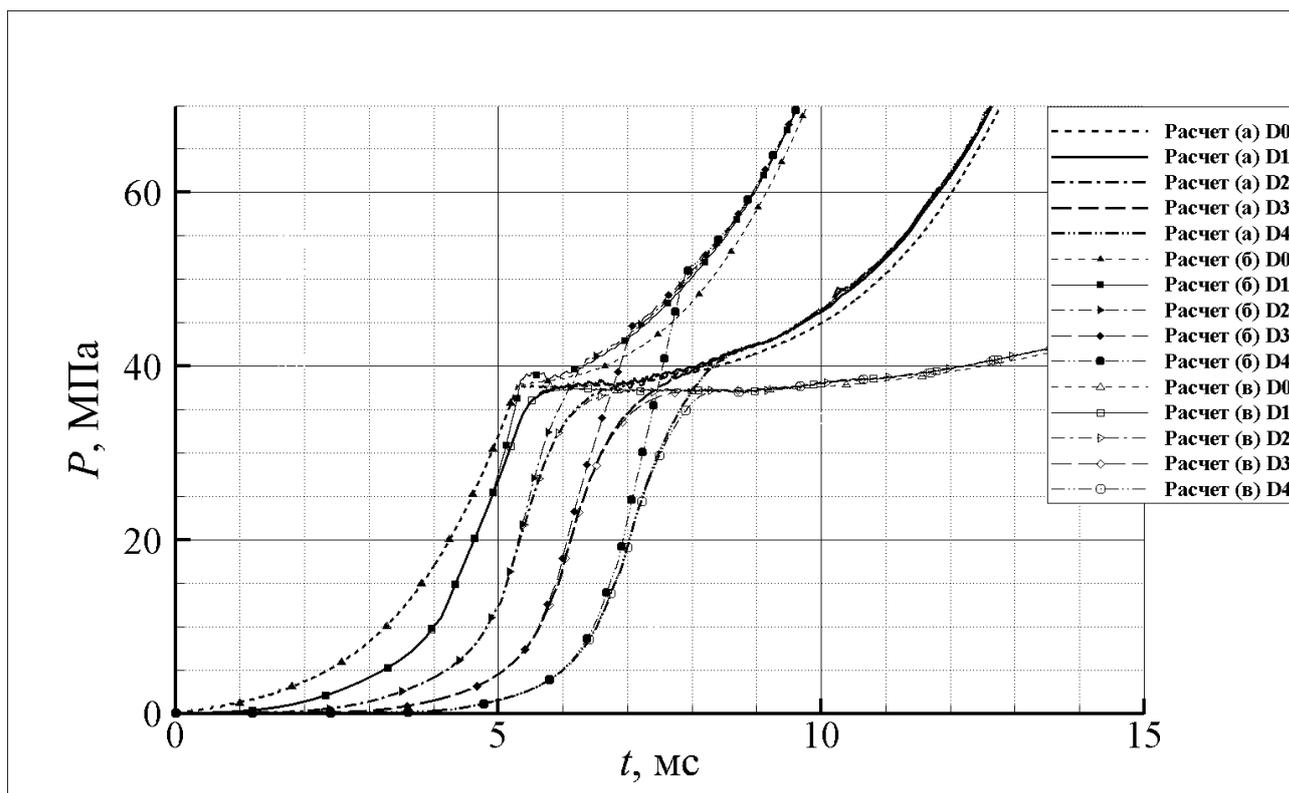


Рис. 18. Расчетные диаграммы давления в 4 положениях по длине образца и в дожигательной секции в опыте по конвективному горению блочного ЭМ №2 при варьировании доли пиролизующейся пленки в порах: (а) $z_f = 0.65$, (б) $z_f = 0.4$, (в) $z_f = 0.9$.

На рис. 19 приведены распределения основных параметров расчета для одномерного среза вдоль оси симметрии установки. На указанный момент времени зона прогрева, в которой температура поверхности пленки увеличивается от начальной до температуры воспламенения составляет 45мм. В этой области находится в основном сжатый воздух и газы от воспламенителя при высокой температуре, при этом объемная доля основного ЭМ и пленки находится на одном уровне, близком к начальной закладке. В зоне пиролиза происходит уменьшение объемной доли пленки, и, соответственно, выделяются в виде соответствующего компонента газовой фазы продукты пиролиза пленки. В соответствии с термодинамическими расчетами температура продуктов пиролиза ПВБ в диапазоне экспериментальных давлений составляет 1000К, что соответствует наблюдаемой в расчете температуре в области пиролиза. Ширина зоны пиролиза составляет 50мм и связана с наклоном графика давления на датчике на диаграмме давление-

время (рис. 17). Чем меньше наклон датчика, тем шире зона пиролиза. Правее на рис. 19 находится зона разгара, в которой объемная доля пленки убывает до 0. В этой области начинается выделение продуктов горения основного ЭМ, имеющих более высокую по сравнению с продуктами пиролиза пленки температуру. В этой области в результате межфазного взаимодействия начинает двигаться основной ЭМ, что отражается на распределении его объемной доли.

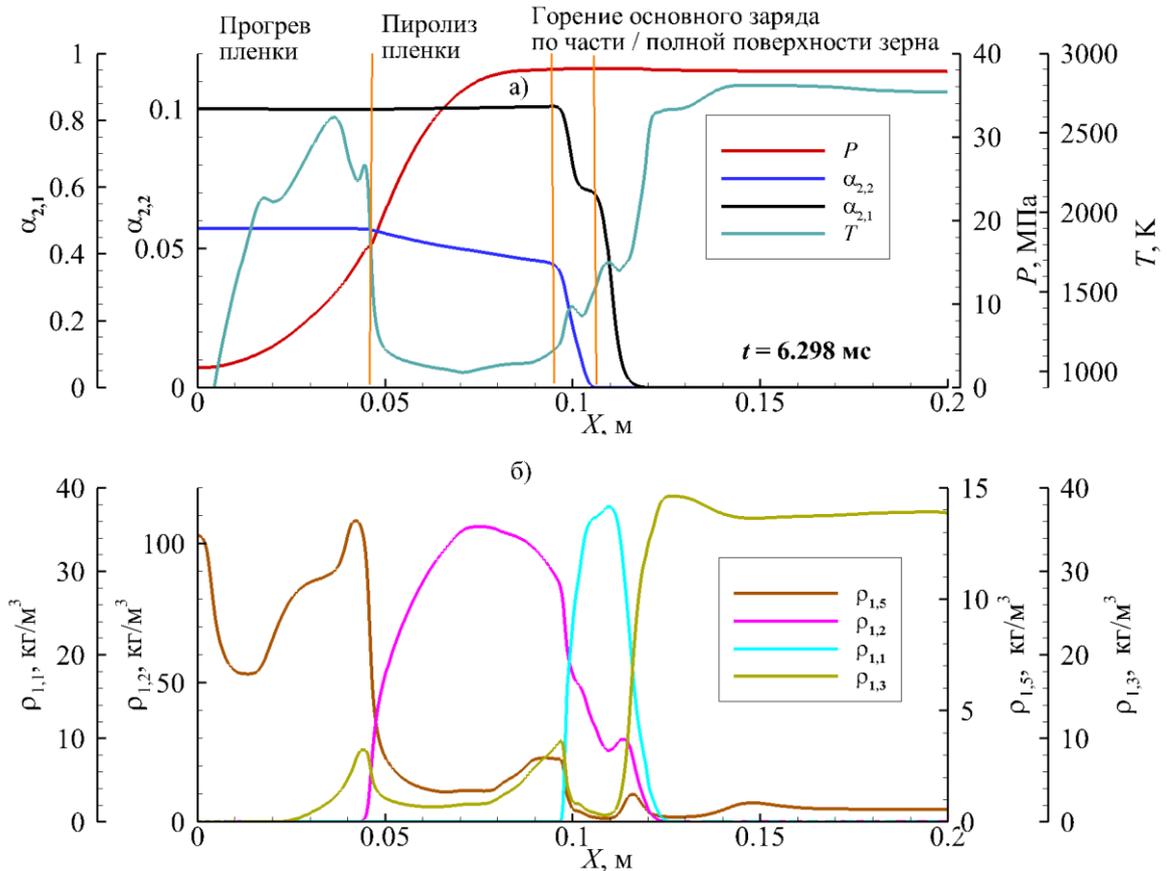


Рис 19 – Расчетные распределение параметров вдоль оси симметрии установки (а) давление газа – P , объемная доля пленки $\alpha_{2,2}$, объемная доля пороха 5/7 – $\alpha_{2,1}$, температура газа – T ; (б) плотность воздуха – $\rho_{1,5}$, продуктов пиролиза пленки ПВБ – $\rho_{1,2}$, продуктов горения зерен 5/7 и пороха «Сокол» – $\rho_{1,1}$ и $\rho_{1,3}$ соответственно.

Также было проведено исследование влияния длительности стадии разгара на процесс конвективного горения. Рассмотрены три значения параметра g , соответствующие длительности стадии разгара 0.32, 0.64 и 1.5 мс. Расчеты (рис. 20) показывают, что начальная стадия процесса практически не изменяется. С другой стороны, снижение длительности разгара приводит к

увеличению темпа роста давления на этой стадии.

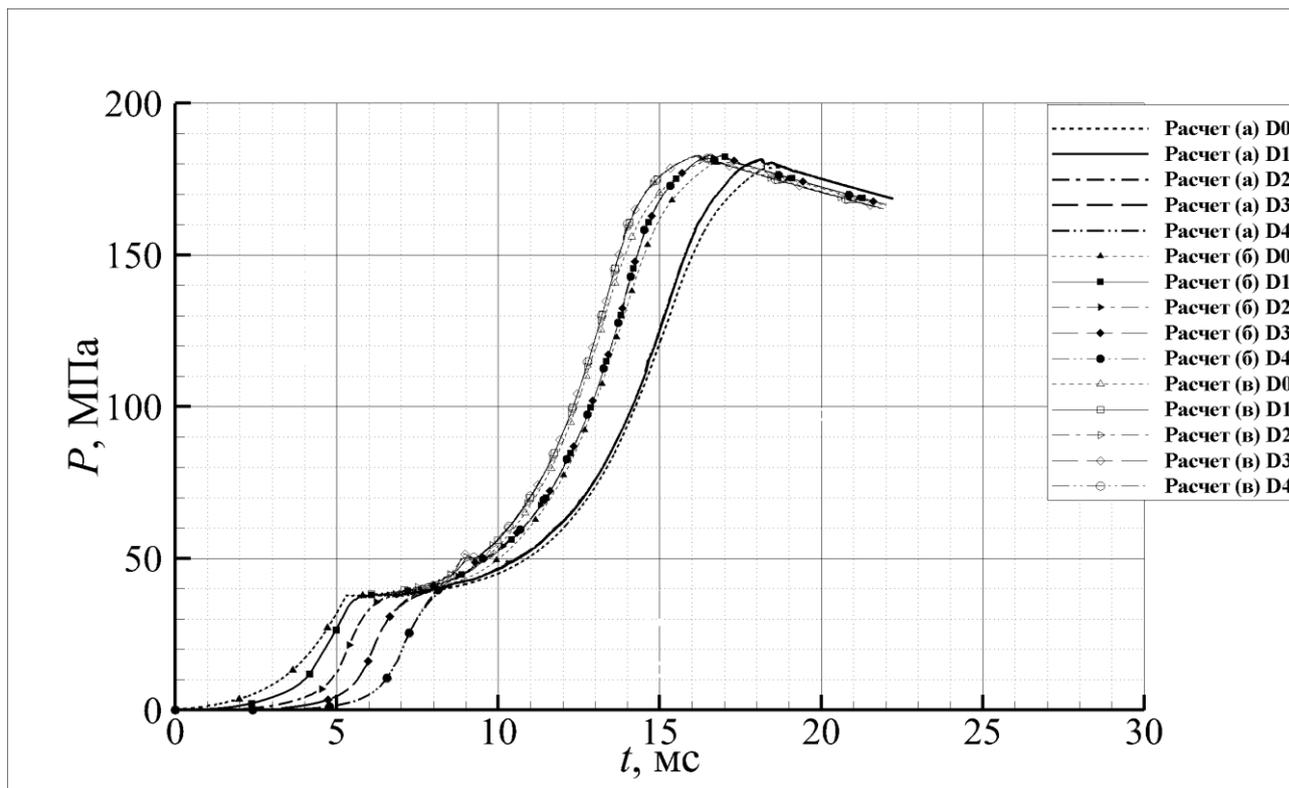


Рис. 20 – Варьирование длительности пиролиза вне пор. (а) $\tau = 1.5\text{мс}$, (б) $\tau = 0.64\text{мс}$, (в) $\tau = 0.32\text{мс}$.

К моменту выравнивания давления во всем образце в расчете остается не воспламенившийся ЭМ в закрытой части оболочки. После выгорания ЭМ давление в расчете снижается медленнее, чем в эксперименте, что связано с отсутствием учета тепловых потерь в расчете.

На рисунке 21 приведен расчет, соответствующий постановке эксперимента №3 [32,33]. После выгорания воспламенителя темп роста давления в расчете и эксперименте заметно различаются. В расчете при заданной величине $z_f = 0.65$ горение основного ЭМ начинается после выравнивания показаний всех датчиков внутри образца. При этом задержка воспламенения возникает за счет того, что в порах образца не успевает пиролизиться заданная доля пленки. При уменьшении z_f до величины 0.5 воспламенение основного ЭМ начинается в момент времени 5 мс, что представлено на рисунке 22.

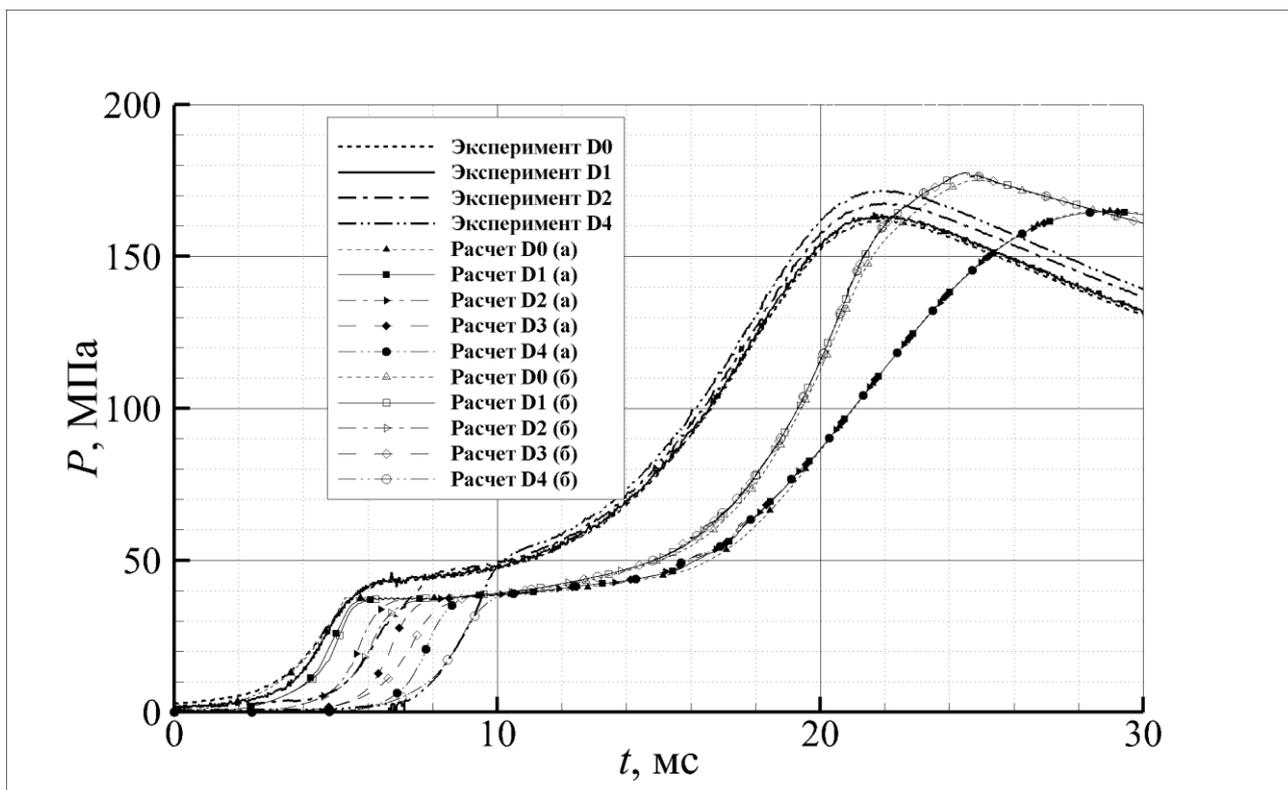


Рисунок 21 - Экспериментальные (линии без символов) и расчетные (линии с символами) диаграммы давления в 4 положениях по длине образца и в дожигательной секции в опыте по конвективному горению блочного ЭМ №3, $z_f=0.65$. Форма зерен: а) сферическая, б) цилиндрическая с каналами 5/7.

В расчетах (рис. 22а) порох основного заряда предполагался сферическим (т.е. площадь поверхности каналов не учитывается при расчете эффективного диаметра зерна и толщины свода горения, а в качестве коэффициентов формы используются коэффициенты формы для сферы). Как темп роста давления после воспламенения ЭМ, так и профиль давления вблизи максимума давления, близки к эксперименту в случае расчета с использованием зерен сферической формы. При этом темп роста давления на стадии горения ЭМ практически не изменяется при изменении величины z_f . Таким образом, в случае образца № 3 можно предположить, что прессование зерен до соответствующей пористости приводит к закрытию каналов в пороховых зернах.

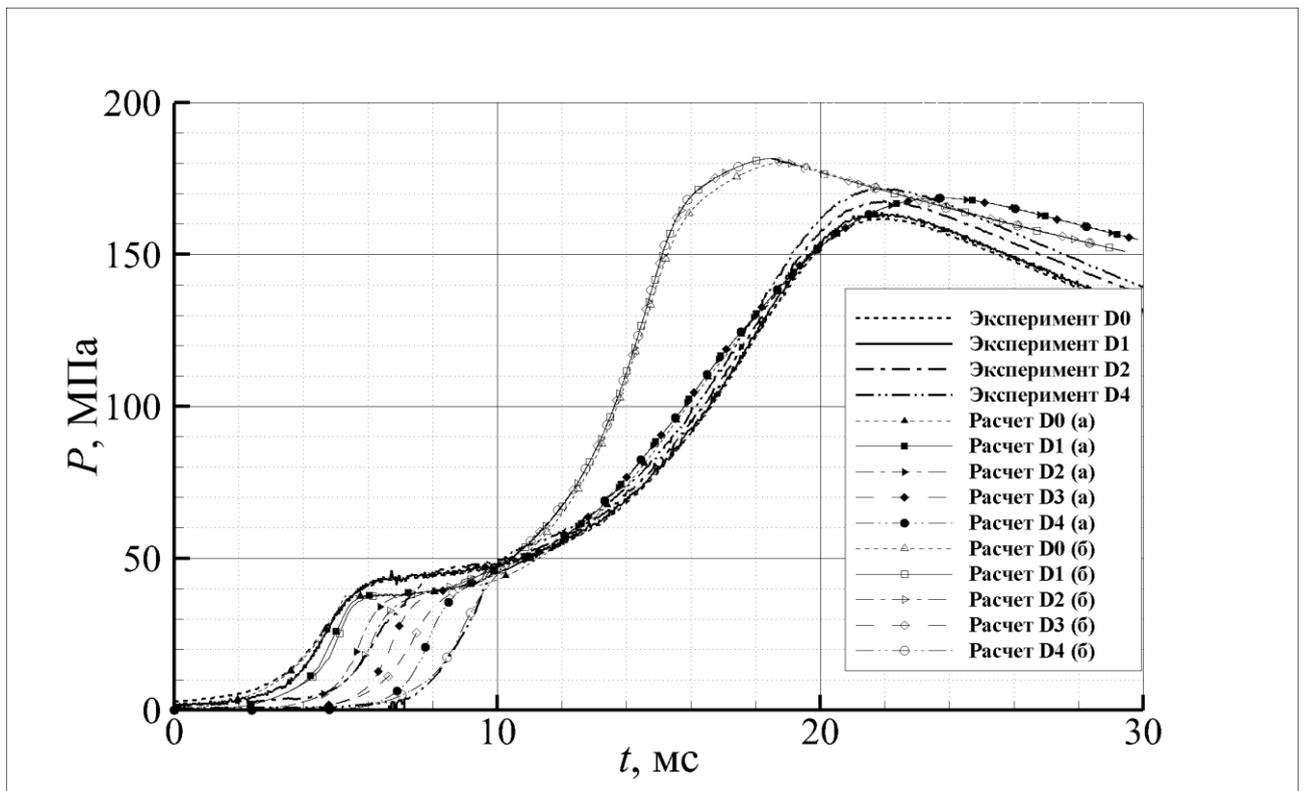


Рисунок 22 – Экспериментальные (линии без символов) и расчетные (линии с символами) диаграммы давления в 4 положениях по длине образца и в дожигательной секции в опыте по конвективному горению блочного ЭМ №3, $z_f=0.5$. Форма зерен: а) сферическая, б) цилиндрическая с каналами 5/7.

Заключение

Построена математическая модель для описания процессов воспламенения и горения ВЗКГ в осесимметричной постановке. Применяемый подход базируется на модели конвективного горения ВЗКГ и модели описания внутрибаллистического процесса в приближении механики взаимопроникающих континуумов. Течение двухфазной смеси описывается моделью Р.И. Нигматулина в предположении абсолютно жестких, несжимаемых и недеформируемых частиц. 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, являющихся гиперболическими и имеющими консервативный вид, 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. Предложенный численный метод учитывает на дискретном уровне особенности системы определяющих уравнений модели ансамбля твердых частиц, которые состоят в наличии разрыва скорости распространения слабых возмущений в фазе частиц при критическом значении объемной доли и

возможности формирования вакуумных областей без 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 и характеристик).

В задаче о распространении волны компактирования по слою частиц с неравномерным распределением объемной доли численно получен эффект опрокидывания волн сжатия за фронтом волны (явление градиентной катастрофы) и формирования волнового поезда.

Проведено исследование разлета предварительно сжатого до сверхкритических значений пристеночного слоя частиц. Получены количественные характеристики и предложено описание механизма отрыва слоя частиц от стенки с образованием пристеночной вакуумной зоны.

Проведено исследование горения энергетического материала в условиях замкнутого объема. Показано хорошее качественное совпадение расчетных и экспериментальных диаграмм давления.

С использованием построенной модели ВЗКГ 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. Получено хорошее количественное совпадение расчетных и экспериментальных диаграмм давления для образцов высокой плотности в установке со сбросом давления при пиролизе 65% пленки в порах до начала

горения основного ЭМ.

Проведенные расчеты показывают, что в образцах наибольшей пористости после сжатия присутствует горение по внутренней поверхности каналов. Для образца наименьшей пористости результаты моделирования позволяют предположить отсутствие горения по внутренней поверхности каналов. Предложенная математическая модель и разработанный численный код могут успешно применяться для задач подбора и оптимизации свойств энергетических материалов, покрытых пленкой.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Menshov 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.
2. *Семенов И. В., Меньшов И. С., Немцев М. Ю.* Математическое моделирование осесимметричных внутрибаллистических процессов //Препринты Института прикладной математики им. МВ Келдыша РАН. – 2017. – №. 143. – С. 143-20.
3. *Немцев М. Ю. и др.* Моделирование фильтрации и конвективного горения в блочных зарядах зерен порошка, ингибированных поливинилбутиралем в постоянном объеме //Nonequilibrium processes. – 2019. – С. 352-363.
4. *Немцев М. Ю., Меньшов И. С., Семенов И. В.* Численное моделирование динамических процессов в среде мелкодисперсных твердых частиц //Математическое моделирование. – 2022. – Т. 34. – №. 8. – С. 73-96.
5. *Немцев М. Ю.* Численное моделирование динамики двухфазной смеси газа и твердых дисперсных частиц//Математическое моделирование. – 2023. – Т. 35. – №. 7. – С. 97-117.

Список литературы

6. Хоменко Ю.П., Ищенко А.Н., Касимов В.З. Математическое моделирование внутрибаллистических процессов в ствольных системах. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999, 255 с.
7. Fan B. C. et al. Interaction of a shock wave with a loose dusty bulk layer //Shock Waves. – 2007. – Т. 16. – №. 3. – С. 179-187.
8. Baer 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.
9. Résal H. A. Recherches sur le mouvement des projectiles dans les armes à feu. – Gauthier-Villars, 1864.
10. Sarrau É. Nouvelles recherches sur les effets de la poudre dans les armes. – 1876.
11. Vieille P. Mémoires des poudres et salpêtres //Paris. – 1890. – Т. 3. – С. 6.
12. Charbonnier P. J. Balistique interieure. – O. Doin, 1908.
13. Дроздов Н. Ф. Решение задач внутренней баллистики для бездымного пироксилинового пороха //Артиллерийский журнал. – 1903. – №. 5.
14. Серебряков М. Е. Внутренняя баллистика ствольных систем и пороховых ракет. – Гос. научно-техническое изд-во Оборонгиз, 1962.
15. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред, Т. 1. – М.: Наука, 1987, 464 с.
16. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред: В 2-х частях Ч. 2. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.
17. Saurel R., Abgrall R. A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows //Journal of Computational Physics. – 1999. – Т. 150. – №. 2. – С. 425-467.
18. Marble F. E. Dynamics of a gas containing small solid particles. – 1963.
19. Крайко А.Н., Стернин Л.Е. К теории течений двухскоростной сплошной среды с твердыми или жидкими частицами Прикладная математика и механика. 1965. Т. 29. № 3. С. 418-429.
20. Gidaspow D. Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions. – Academic press, 1994.
21. Порошина Я. Э., Уткин П. С. Численное моделирование взаимодействия нормально падающей ударной волны со слоем частиц в рамках уравнений Баера-Нунциато //Горение и взрыв. – 2020. – Т. 13. – №. 1. – С. 95.
22. Houim R. W., Oran E. S. A multiphase model for compressible granular-gaseous flows: formulation and initial tests //Journal of fluid mechanics. – 2016. – Т. 789. – С. 166-220.
23. McGrath T. P., St. Clair J. G., Balachandar S. A compressible two-phase model for dispersed particle flows with application from dense to dilute regimes //Journal of Applied Physics. – 2016. – Т. 119. – №. 17. – С. 174903.

24. *Saurel R., Chinnayya A., Carmouze Q.* Modelling compressible dense and dilute two-phase flows // *Physics of fluids*. – 2017. – Т. 29. – №. 6. – С. 063301.
25. *Крайко А.Н.* О корректности задачи Коши для двухжидкостной модели течения смеси газа с частицами // *Прикладная математика и механика*. 1982. 46. Вып. 3. 420–428.
26. *Крайко А. Н.* Математические модели для описания течений газа и инородных частиц и нестационарной фильтрации жидкости и газа в пористых средах, *Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование*, 2014, том 7, выпуск 1, 34–48.
27. *Осипцов А.Н.* Исследование зон неограниченного роста концентрации частиц в дисперсных потоках // *Изв. АН СССР. МЖГ*. 1984. N 3. С. 46–52.
28. *Осипцов А.Н.* Движение запыленного газа в начальном участке плоского канала и круглой трубы // *Изв. АН СССР. МЖГ*. 1988. N 6. С. 80–87.
29. *Беляев А. Ф.* и др. *Переход горения конденсированных во взрыв*. – Наука, 1973, 292 с.
30. *А.А.Сулимов, Б.С.Ермолаев.* Квазистационарное конвективное горение в энергетических материалах с низкой пористостью (Часть 1) // *Журнал «Химическая физика»*, т.16, № 9, с.51–72
31. *А.А.Сулимов, Б.С.Ермолаев.* Квазистационарное конвективное горение в энергетических материалах с низкой пористостью (Часть 2) // *Журнал «Химическая физика»*, 1997, т.16, № 10, с.77-97
32. *Ермолаев Б.С., Сулимов А.А.* *Конвективное горение и низкоскоростная детонация энергетических материалов*. М.: Торус пресс, 2017, 400 с.
33. *Ермолаев Б. С.* *Конвективное горение и переход к низкоскоростной детонации в пористых энергетических материалах: Дис. ... доктора физико-математических наук: 01.04.17 / Ермолаев Борис Сергеевич; [Место защиты: ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук], 2020.- 310 с.*
34. *Juhasz A.A., May I.W., et al.* Combustion characteristics of consolidated propellants. // *Proceedings of the 16-th JANAF combustion meeting*. Monterey, Ca. 1979.
35. *Bonnet C., Pieta P.D., Reynaud C.* Investigations for modeling consolidated propellants // *Proceedings of the 19th international symposium of ballistics*. Interlaken, Switzerland; May 7-11. – 2001.
36. *Xiao Z., Ying S., Xu F.* Deconsolidation and combustion performance of thermally consolidated propellants deterred by multi-layers coating // *Defence Technology*. – 2014. – V. 10. – №. 2. – pp. 101-105.
37. *Kuo K. K., Kovalcin R. L., Ackman S. J.* Convective burning in isolated solid propellant cracks. – *Government-Industry Data Exchange Program*, 1979.
38. *Kuo K. K. et al.* Transient combustion in mobile gas-permeable propellants // *Acta Astronautica*. – 1976. – Т. 3. – №. 7-8. – С. 573-591.

39. *Ермолаев 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.
40. *Clain S., Rochette D.* First-and second-order finite volume methods for the one-dimensional nonconservative Euler system // *Journal of computational Physics*. – 2009. – Т. 228. – №. 22. – С. 8214-8248.
41. *Rochette D., Clain S., Bussiere W.* Unsteady compressible flow in ducts with varying cross-section: Comparison between the nonconservative Euler system and the axisymmetric flow model // *Computers & fluids*. – 2012. – Т. 53. – С. 53-78.
42. *Меньшов И. С.* Точные и приближенные решения задачи Римана для уравнений сжимаемых двухфазных течений // *Математическое моделирование*. – 2016. – Т. 28. – №. 12. – С. 33-55.
43. *Serezhkin A., Menshov I.* On solving the Riemann problem for non-conservative hyperbolic systems of partial differential equations // *Computers & Fluids*. – 2020. – Т. 210. – С. 104675.
44. *Einfeldt B. et al.* On Godunov-type methods near low densities // *Journal of computational physics*. – 1991. – Т. 92. – №. 2. – С. 273-295.
45. *Burcat A., Ruscic B.* Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with updates from Active Thermochemical Tables ANL-05/20 and TAE 960 Technion-IIT // *Aerospace Engineering, and Argonne National Laboratory. – Chemistry Division. – 2005.*
46. *Кутателадзе С. С.* Теплопередача и гидродинамическое сопротивление: Справочное пособие. – Энергоатомиздат, 1990.
47. *Родионов 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.
48. *van Leer B., Nishikawa H.* Towards the ultimate understanding of MUSCL: Pitfalls in achieving third-order accuracy // *Journal of Computational Physics*. – 2021. – Т. 446. – С. 110640.
49. *Gossler A.* Moving Least-Squares: a numerical differentiation method for irregularly spaced calculation points // *SANDIA Report, SAND2001-1669. – 2001.*
50. *G.D. van Albada, B. van Leer, W. Roberts,* A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics // *Astron. Astrophys*, 108 (1982)
51. *Годунов С. К. и др.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. – 1976.
52. *Lax P. D.* Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves. – *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 1973.

53. *Toro E. F.* Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction. – Springer Science & Business Media, 2013.
54. Radhakrishnan, K., and A.C. Hindmarsh. Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-113855. 1993. 124 p.
55. Forum, M. P. MPI: A Message-Passing Interface Standard : tech. rep. / M. P. Forum. — Knoxville, TN, USA, 1994.
56. CFD General Notation System. Электронный ресурс. – URL: <https://cgns.github.io/index.html> (дата обр. 01.06.2021).
57. LaSalle D., Karypis G. Multi-threaded graph partitioning //2013 IEEE 27th International Symposium on Parallel and Distributed Processing. – IEEE, 2013. – С. 225-236.
58. Семенов И. В. и др. Применение многопроцессорной вычислительной техники для решения задач внутренней баллистики //Вычислительные методы и программирование. – 2011. – Т. 12. – №. 1. – С. 183-193.
59. JSON. Электронный ресурс. – URL: <https://www.json.org/json-en.html> (дата обр. 01.06.2021).
60. *Shu C. W., Osher S.* Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II //Upwind and High-Resolution Schemes. – Springer, Berlin, Heidelberg, 1989. – С. 328-374.