Методика и комплекс программ ГРАД для решения нестационарных задач механики сплошной среды

А.А. Брагин, В.А. Сучков, А.С. Шнитко

Российский Федеральный Ядерный Центр -
Всероссийский научно - исследовательский институт
технической физики (РФЯЦ - ВНИИТФ)
г. Снежинск Челябинской области

Введение

Доклад с аналогичным названием был сделан основателем методики ГРАД и многолетним руководителем коллектива, разрабатывающим эту методику, Сучковым Виктором Андреевичем в 1995 году в Лос Аламосе на одной из совместных конференций ядерных лабораторий России и США /1/. В нем были представлены общие принципы методики и организации комплекса программ ГРАД. Приведены примеры доказательства корректности методики и программы путем сравнения численных результатов с точными решениями, т.е. рассказано о верификации методики. В настоящем докладе я хочу рассказать о валидации модели. Вначале напомню общие принципы организации комплекса, кратко остановлюсь на реализованных физико математических моделях и затем представлю результаты расчетов в сравнении с экспериментальными данными.

Основы методики ГРАД.

Методика и комплекс программ ГРАД предназначены для решения нестационарных задач о движении неоднородной сплошной среды на ЭВМ. В методике ГРАД для описания движения среды используются гидродинамическая и упруго-пластическая модели, имеется необходимый набор уравнений состояния, производится расчет "размазанных" ударных и детонационных волн. Для расчета детонационных волн реализованы различные модели кинетики перехода взрывчатых веществ (ВВ) в продукты взрыва (ПВ). При расчете упруго-пластических течений возможен учет разрушения материала по предельным главным напряжениям с образованием трещин (одна, две, три - полное разрушение). Для моделирования больших деформаций неоднородной среды применяется метод концентраций.

Методика ГРАД неоднородная, адаптируемая к решению задачи. Рассчитываемая система по некоторым признакам разбивается на ряд областей. В каждой области независимо строится разностная сетка. В ячейках и узлах сетки задаются исходные величины. При этом создается топологическая и физическая структура сеточных областей (разрез задачи), для которой решаются соответствующие принятой модели разностные уравнения МСС.

Счет задач производится по областям со своим шагом по времени в каждой области, причем в разных областях могут использоваться различные модели движения среды: гидродинамика, упруго-пластика, односкоростная модель движения смеси. Связь областей друг с другом осуществляется через граничные условия, реализованные так, что возможен параллельный счет по областям на многопроцессорных ЭВМ. Для расчета используется, в основном, лагранжева система координат, на контактных границах областей допускается скольжение веществ. В общем случае, контактные границы описываются двумя наборами точек, принадлежащих соседним областям. Для установления соответствия между точками таких границ применяются алгоритмы определения соседства точек. Согласование движения соседних точек контактных границ соприкасающихся областей осуществляется постановкой граничных условий, полученных из непрерывности нормальных составляющих векторов скорости и поверхностных сил на границе.

Для поддержания удовлетворительного качества сетки в областях используется возможность произвольного движения узлов сетки. При нелагранжевом движении точек сетки считаются потоки однородных веществ и смесей через границы соседних ячеек с учетом возможного положения границ раздела веществ. При сильных искажениях сетки в области или ее фрагменте применяется локальный пересчет сетки и величин без изменения числа точек. Если в процессе расчета первоначально выбранный разрез задачи приходит в противоречие с изменившимся характером движения среды (появились новые контактные разрывы, выродились некоторые области и т.п.), то происходит прерывание

регулярного счета и создается новый разрез задачи: выбирается новая система областей, для них строятся подходящие сетки, производится пересчет величин со старого разреза на новый разрез (глобальный пересчет). Новый разрез задачи может включать в себя и области старого разреза. После построения, подходящего к новым условиям течения разреза, продолжается регулярный счет задачи. Процедура создания нового разреза задачи, в части выбора новой системы областей, существенно зависит от конкретной задачи и формализуется с большими трудностями. Здесь следует использовать априорную информацию, получаемую при решении определенных классов задач. При расчете сложных задач может быть несколько прерываний регулярного счета для построения нового разреза. Более простые задачи могут быть досчитаны до конца без прерывания регулярного счета.

Комплекс программ ГРАД в своем составе имеет программы для расчета одномерных, двумерных и трехмерных нестационарных течений Базовой методикой ГРАД является двумерная методика ГРАД-2 для расчета плоских или осесимметричных течений, которая построена на разностной схеме типа "Крест" второго порядка точности в лагранжевых переменных. При нелагранжевом законе движения точек сетки считаются потоки массы, количества движения, энергии по схемам первого порядка точности. Разностная схема для одномерной методики ГРАД-1 получена из разностной схемы ГРАД-2 с использованием условий симметрии течения (плоская, цилиндрическая сферическая). За основу трехмерной методики ГРАД-3 взята двумерная методика ГРАД-2, к ней добавлена третья пространственная переменная - эйлерова. Для плоских сечений по эйлерову направлению используется модифицированная методика ГРАД-2: дополнительно считается третья компонента вектора скорости, учитываются градиенты и потоки величин по эйлеровой переменной. Здесь эйлеровы потоки считаются по гибридной схеме первого или второго порядка точности с переключателем. Комплекс программ ГРАД-3 построен так, что массивы основных величин и граничные последовательности трехмерной задачи организованы в виде двумерных сечений по третьему (эйлерову) пространственному направлению. Счет шага реализован методом расщепления: один полушаг - программа счета для двумерного сечения, типа двумерной программы счета шага комплекса ГРАД-2; другой полушаг - новая программа для счета по эйлерову направлению. Комплекс ГРАД-3 использует сервисные возможности двумерного комплекса ГРАД-2.

Физико математические модели

В рамках проекта МНТЦ 2040 была выполнена работа по созданию программного комплекса для моделирования процесса прессования керамических деталей. В отчете /2/ сделан подробный обзор существующих теоретических и полуэмпирических моделей поведения твердых тел при динамических нагрузках.

Систему уравнений, описывающих течение упругопластической сплошной среды, составляют дифференциальные следствия интегральных законов сохранения и определяющие соотношения. В качестве определяющих соотношений рассматриваются: уравнения состояния; закон течения для девиатора тензора напряжений; модель разрушения; модель поведения пористой среды.

Законы сохранения

Запишем законы в прямоугольной декартовой системе координат X_i (i = 1,2,3), считая $X_1 = x$, $X_2 = y$, $X_3 = z$:

$$\rho\dot{u}_i = \sigma_{i,j},$$
$$\rho\dot{V} = u_{i,j}, \qquad (1.1)$$
$$\rho\dot{E} = \frac{1}{2}\sigma_{i,j}\left(u_{i,j} + u_{j,i}\right) + div\left(\kappa \cdot gradT\right)$$

Первое уравнение системы (1.1) является следствием закона сохранения импульса, второе – массы, третье – энергии. В записи системы уравнений (1.1) использованы обозначения: ρ – плотность, $V = 1/\rho$ – удельный объем, u_i – вектор массовой скорости, $\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + S_{ij}$ – тензор напряжений, S_{ij} – его девиатор, P – давление, δ_{ij} – символ Кронекера, E – удельная внутренняя энергия, T – температура, κ– коэффициент теплопроводности, $f_{i,j} = \dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$.

Точка над функцией обозначает ее полную (субстанциональную) производную по времени. По одинаковым индексам i,j осуществляется суммирование.

Законы течения для девиатора тензора напряжений

Модели упруго-пластического деформирования базируются на определяющих соотношениях для девиатора тензора напряжений S_{ij}. В приближении изотропного тела запишем их в форме уравнений Прандтля-Рейса

$$\dot{S}_{ij} = 2\mu\dot{e}_{ij} - \lambda S_{ij}, \qquad (1.2)$$

где $\lambda \geq 0$ является скалярной диссипативной функцией, а вращательный член опущен, μ – модуль сдвига, $\dot{e}_{ij}$ – девиатор тензора скоростей деформаций. Конструирование функции λ определяет ту или иную модель течения. В частности, модели идеального упруго-пластического тела Мизеса с пределом текучести Y, зависящим только от термодинамического состояния, отвечает функция

$$\lambda = \begin{cases} \dfrac{3\mu}{Y^2} S_{ij}\dot{e}_{ij} - \dfrac{\dot{Y}}{Y}, & S_{ij}S_{ij} = \frac{2}{3}Y^2, \\ 0, & S_{ij}S_{ij} < \frac{2}{3}Y^2. \end{cases} \qquad (1.3)$$

Зависимость модуля сдвига от плотности, температуры и уравнения состояния принимается в виде

$$\mu = \frac{3}{2}\frac{1-2\nu_0}{1+\nu_0} \cdot \eta_{\text{Т}} \cdot \rho \cdot \left.\frac{dp}{d\rho}\right|_{S=const} \qquad (1.4)$$

где S – энтропия, ν_0 – коэффициент Пуассона при нормальных условиях, $\eta_{\text{Т}}$ – температурный множитель.

Квазистатический предел текучести Y_A моделируется зависимостью от пластической деформации ε, давления и температуры:

$$Y_A = \left[Y_0 + f(P)\right] \cdot \eta_\varepsilon(\varepsilon) \cdot \eta_T(T) \qquad (1.5)$$

В (1.21) η_ε – множитель, ответственный за деформационное упрочнение (или разупрочнение). В случае упрочняющегося на пластических деформациях материала примем зависимость $\eta_\varepsilon(\varepsilon)$ также как в модели SG:

$$\eta_\varepsilon = \min\left\{\eta_\varepsilon^{\max}, \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_*}\right)^a\right\}, \qquad (1.6)$$

считая ε_*, a и $\eta_\varepsilon^{\max}$ константами. Функцию $f(P)$ определим для положительных давлений, считая её непрерывно возрастающей до величин Y_{00}–Y_0 и имеющей непрерывную, линейно зависящую от давления, первую производную:

$$Y_0 + f(P) = \min\left\{Y_{00}, Y_0 + \alpha P\left[1 - \frac{\alpha P}{4(Y_{00} - Y_0)}\right]\right\}, \qquad (1.7)$$

где α и $Y_{00} > Y_0$ – константы материала, $\alpha P \le 2(Y_{00} - Y_0)$.

При расчете в декартовых координатах методом концентраций используется односкоростная модель. В смешанных ячейках тензор напряжений и удельная внутренняя энергия среды вычисляется из условия пропорционального приращения объемов компонент. Среднее давление в смешанной ячейке (или давление среды) определяется по объемным концентрациям:

$$p = \sum_i \beta_i p_i ,$$

где p_i – давление i – той компоненты, $\beta_i = V_i / V$ - объемная концентрация i – той компоненты.

Аналогично вычисляются параметры для нахождения тензора напряжений среды: коэффициент Пуассона, предел текучести и прочностные константы. Удельная внутренняя энергия в среде определяется по массовым концентрациям:

$$E = \sum_i \alpha_i E_i ,$$

где E_i – удельная внутренняя энергия i – той компоненты, $\alpha_i = M_i / M$ – массовая концентрация i – той компоненты.

Модели детонации.

В комплексе программ ГРАД для расчета детонационных волн реализованы различные выражения для скорости разложения взрывчатых веществ (ВВ). Отметим некоторые из них.

1. Модельная кинетика перехода ВВ в ПВ для высокочувствительных ВВ.

$$\frac{\partial g}{\partial t} = C_g W (1 - g)$$

Здесь g – массовая концентрации ПВ, $W = W(\rho)$.

2. Полуэмпирическая модель макрокинетики детонации низкочувствительных ВВ, предложенная Г.Н. Рыковановым, Н.С. Еськовым и др. /3/
3. Полупроводниковая модель инициирования детонации ТАТБ, предложенная К.Ф. Гребенкиным /4/.

$$\frac{d\xi}{dt} = \exp\{F[T(t)]\} \quad при\ t - t_f > t_1(T_f)$$

$$F(T) = \begin{cases} F_1 + A_1 \cdot [T(t) - T_1] & при\ T(t) \ge T_1 \\ F_1 - A_2 \cdot [T_1 - T(t)] & при\ T(t) < T_1 \end{cases}$$

$$t_1(T_f) = K \cdot \exp\{F[T_f]\} \quad T(t) = T_f + A \cdot (P(t) - P_f) + B \cdot (P(t) - P_f)^2$$

Последняя модель, в отличие от полуэмпирических моделей, исходит из конкретной микрофизической модели процесса разложения гетерогенного ВВ и опирается на результаты компьютерного моделирования распространения волны горения из микроочагов. Параметры реализованной макрокинетики имеют вполне определенный физический смысл. Их значения можно определить без привлечения результатов экспериментов по инициированию детонации. Кроме того эта модель описывает эффект сильной зависимости ударноволновой чувствительности ТАТБ от температуры.

Валидация методики ГРАД.

Расчет профиля напряжения в волне с амплитудой 2.1 ГПа.

Задача одномерная, плоская. Шаг пространственной сетки был равен 0.1 мм. В расчете использовалось уравнение состояния Ми-Грюнайзена с коэффициентом Грюнайзена $\Gamma = 2$, $c_0 = 5.33$ км/с, $n = 3$, $\rho_0 = 2.705$ г/см^3.

Результаты расчета сравниваются с экспериментальными данными /5/.

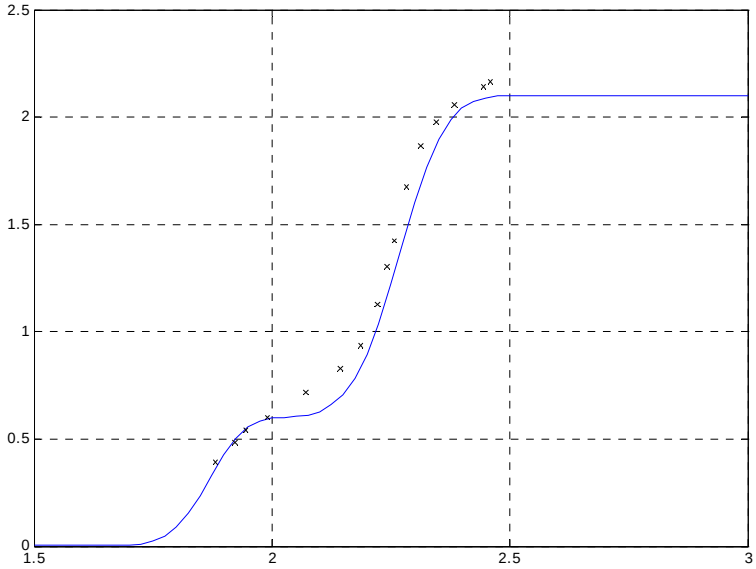


Рисунок 1. Зависимость напряжения от времени. Сплошная линия – численные данные, маркеры – эксперимент. Амплитуда волны 2.1 ГПа, толщина образца 12.5 мм.

Задача о соударении цилиндров с жесткой преградой

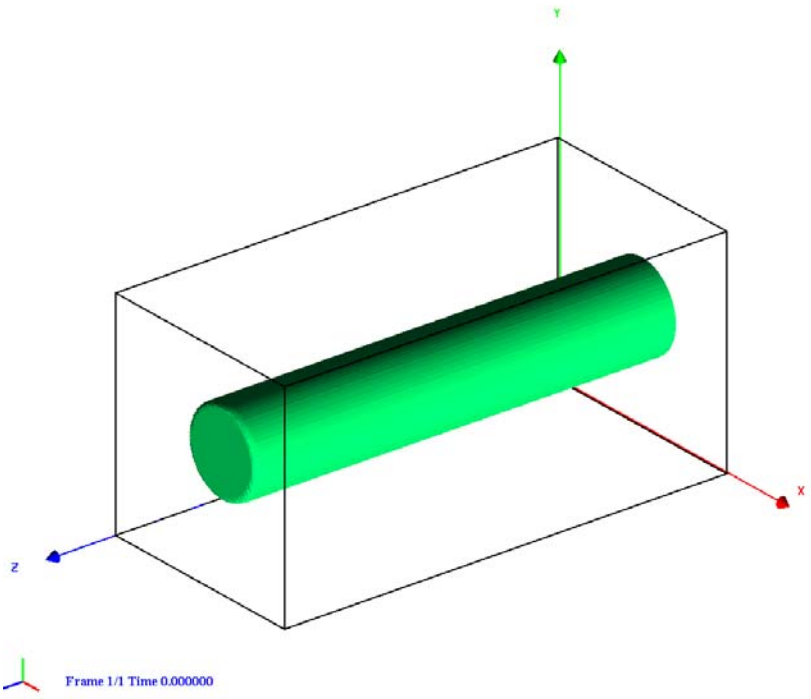


Рисунок 2

Рассчитывалась задача: удар алюминиевого цилиндра о жесткую преграду. Диаметр цилиндра – 0.64 см. Высота цилиндра – 3.177 см. Начальная скорость цилиндра – 0.2 км/с. Система координат – прямоугольная декартовая. Процесс в области – смесь с упругопластическими свойствами. На рисунке 2 изображена начальная геометрия системы в виде изоповерхности объемной концентрации алюминия величиной 0.5. Параметры уравнения состояния алюминия - $\rho_к$=2.708 г/см^3, γ=3.0, n=3.0, ν=0.34, y_0=0.29, y_1=1.1, $\sigma_{мех}$=2.0. Второе вещество в области – воздух. На всех границах задана нулевая нормальная скорость.

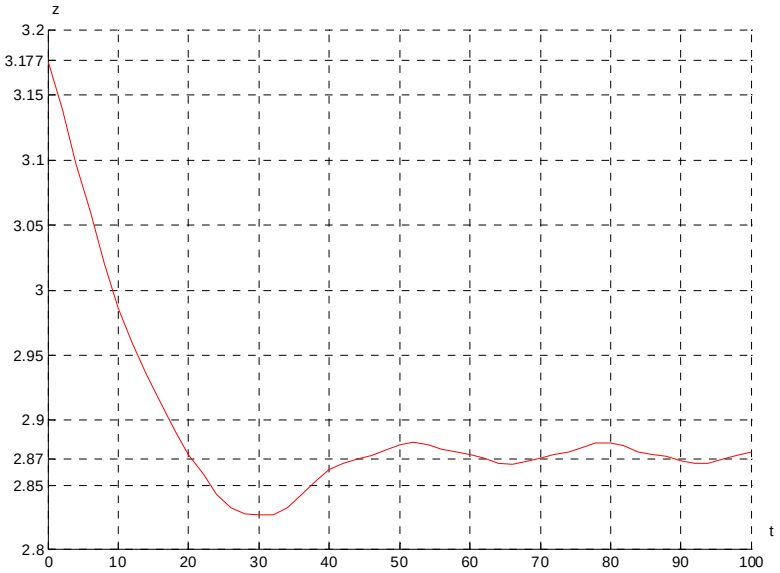


Рисунок 3. Зависимость длины стержня от времени. Граница свободного конца стержня определялось по положению изоповерхности объемной концентрации 0.5.

Аналогичные расчеты были проведены с урановым, стальным и медным стержнями. Экспериментальные данные взяты из /6/

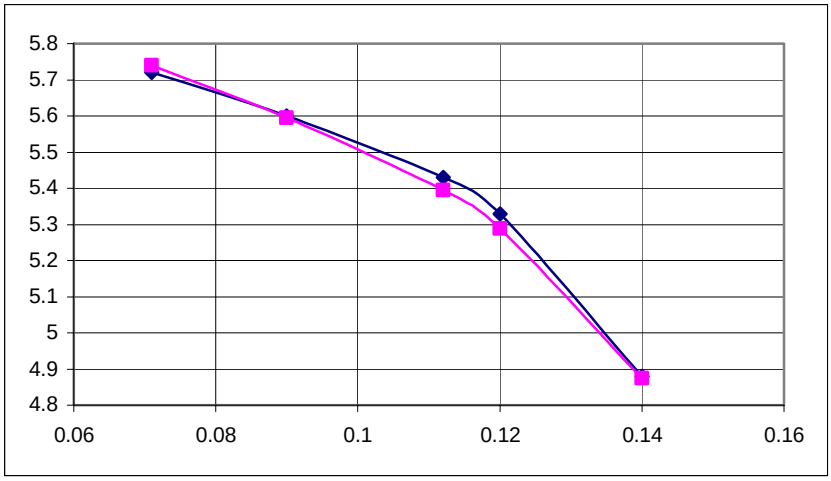


Рисунок 4. Зависимость конечной длины уранового цилиндра [см] от скорости соударения [км/с]. Черная линия – эксперимент, малиновая – расчет ГРАД.

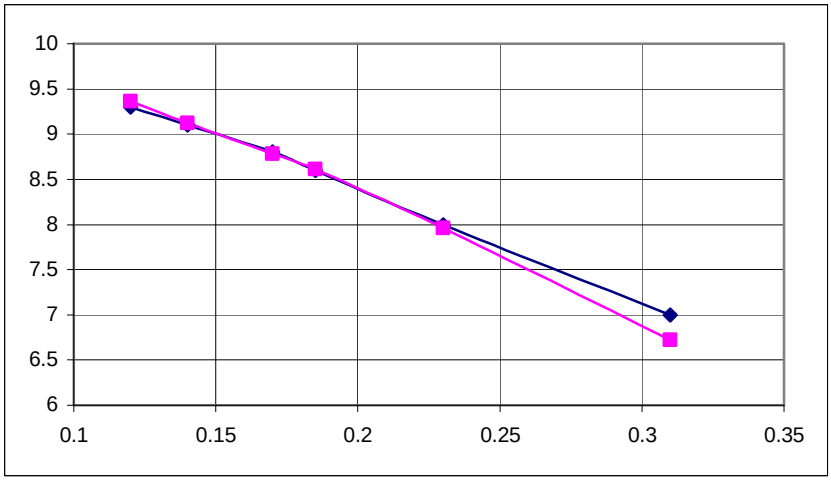


Рисунок 5. Зависимость конечной длины стального стержня от скорости соударения. Черный цвет – эксперимент. Малиновый – расчет Y0=0.45 ГПа α=1, Ymax=1.5ГПа

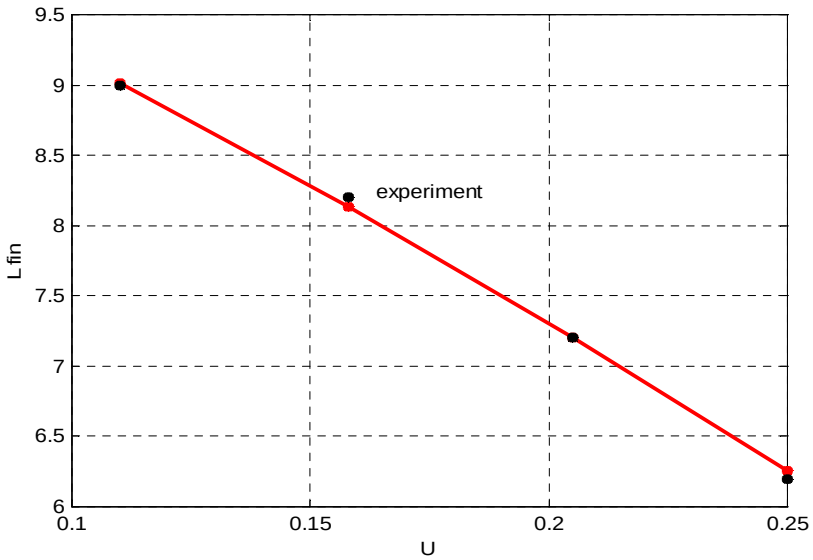


Рисунок 6. Зависимость конечной длины медного стержня от скорости соударения. Черный цвет – эксперимент. Малиновый – расчет Y0=0.36 ГПа α=1, Ymax=0.4ГПа

Задача о прессовании профильных деталей.

Начальная геометрия показана на следующих рисунках.

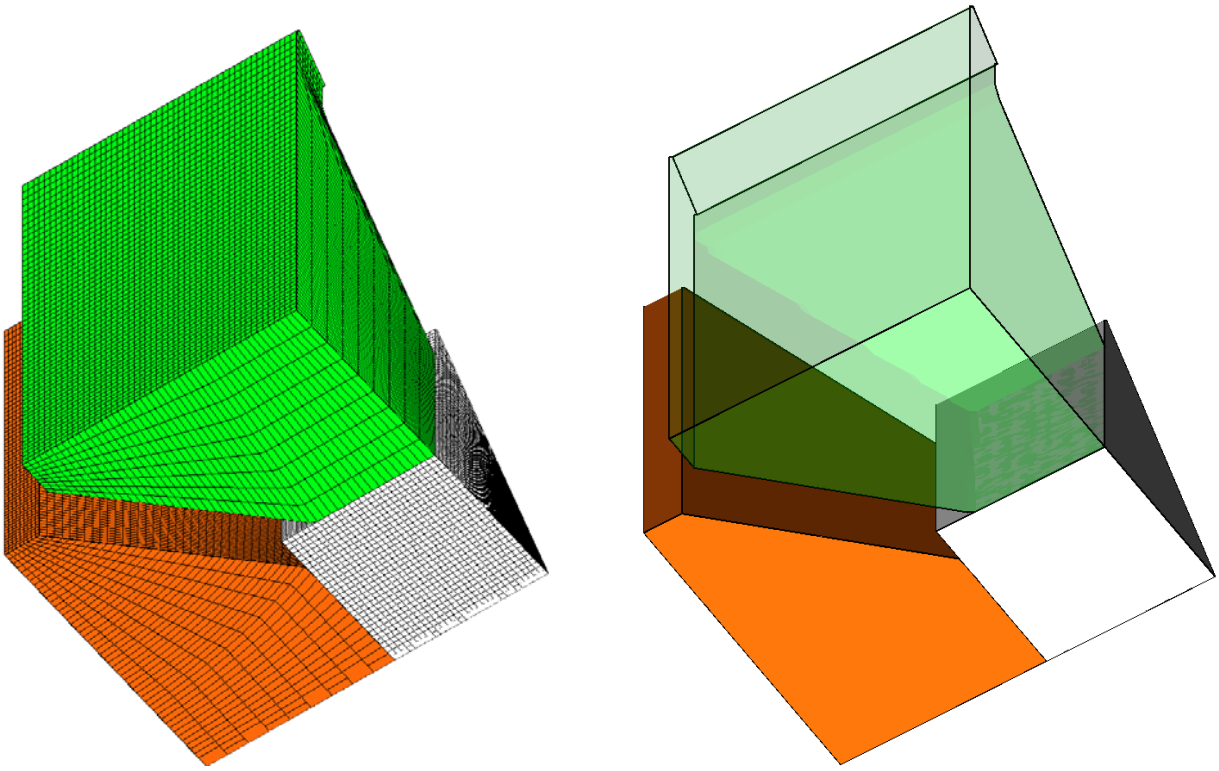
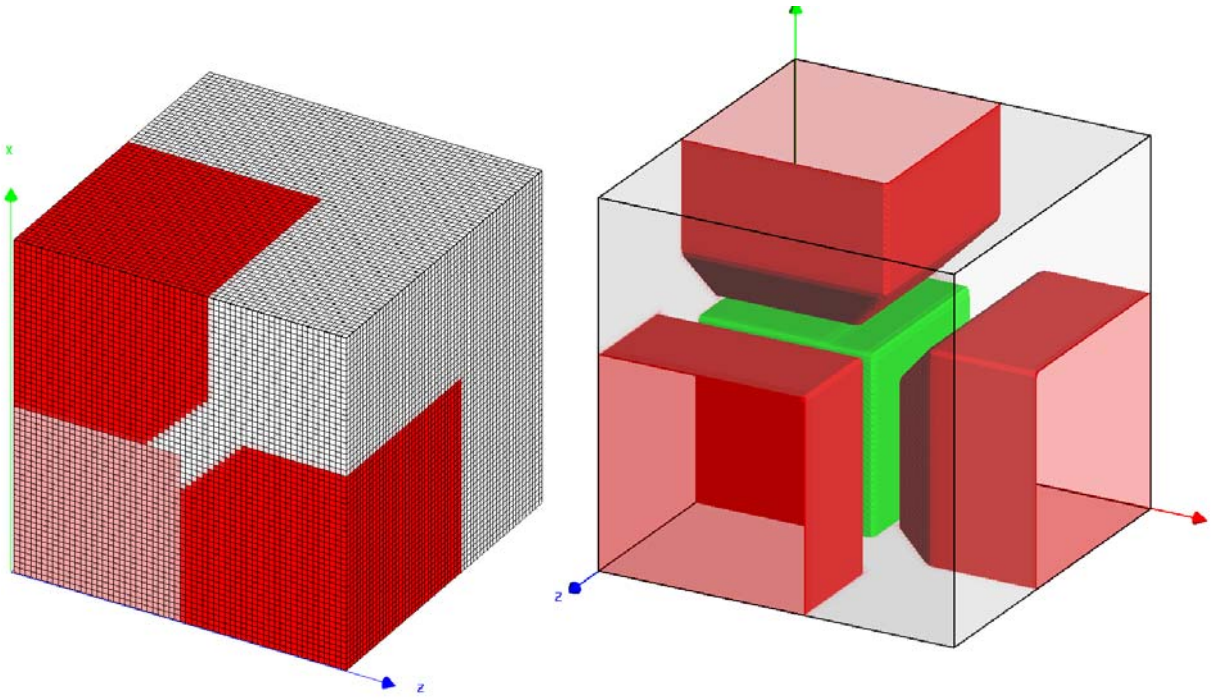


Рисунок 7. Начальная геометрия для расчета в цилиндрических координатах:



а) б)

Рисунок 8. Начальная геометрия задачи в декартовых координатах для счета методом концентраций. На рисунке а) вещества изображены различными цветами: красный – пресс, розовый – алюминиевый куб, белый - воздух. На рисунке б) изоповерхностями выделены границы раздела веществ.

Расчеты проводились в газодинамическом приближении и с учетом упругопластических свойств, в двумерной и трехмерной постановках, в цилиндрических координатах на смешанной эйлерово-лагранжевой сетке. Скорости подачи пресса варьировались в 2D расчетах от 1000 до 0.5 м/с, в 3D расчетах 100 и 10 м/с.

В следующей таблице приведены результаты расчетов в сравнении между собой. Экспериментальных данных у нас нет.

Доля вытесненной массы алюминия в % при смещении пресса на 2.5 мм.

тип расчета	10 м/с	100м/с
2D газодинамика +упругопластика	22.6	19.7
3D газодинамика смесь	29.4	27.5
3D газодинамика +упругопластика смесь	28.3	25.6
3D газодинамика в цилиндрических координатах		28.6%

Из таблицы видно, что расчеты в декартовых координатах методом концентраций и в цилиндрических координатах на лагранжево-эйлеровой сетке отличаются на 1.1 %. При уменьшении скорости в 10 раз доля вытесненной массы алюминия увеличивается на 2-3%. На следующих рисунках показана форма получившейся детали.

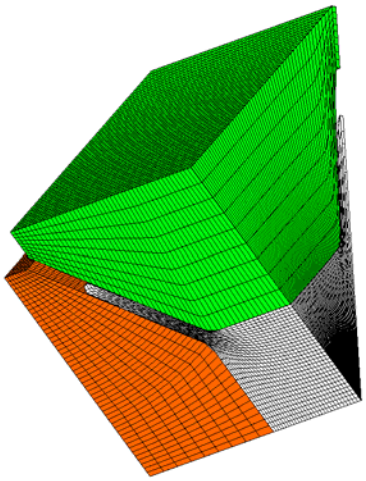


Рисунок 9. Положение системы в многообластной постановке на момент времени 30 мкс

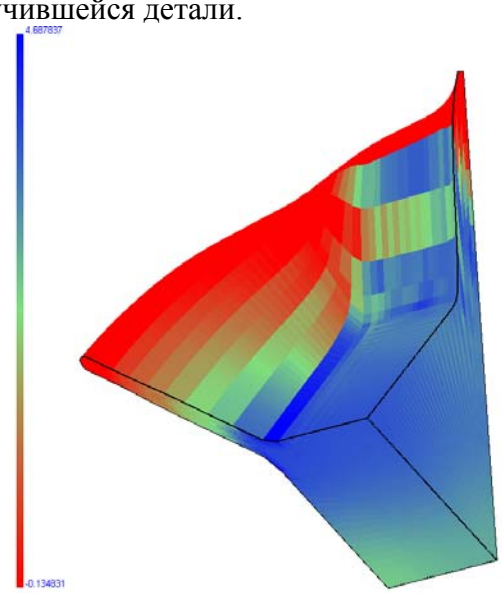


Рисунок 10. Распределение давления в алюминии на момент времени 30 мкс:

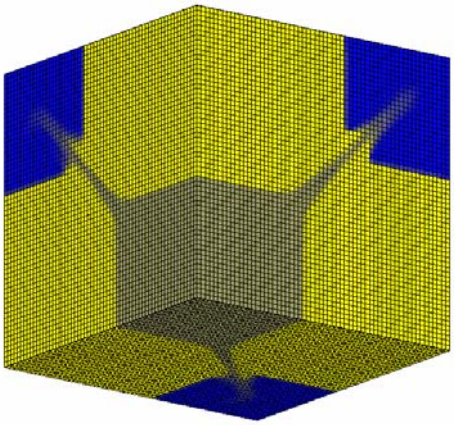


Рисунок 11 Изометрическое представление системы на момент времени 30 мкс, раскраска по плотности.

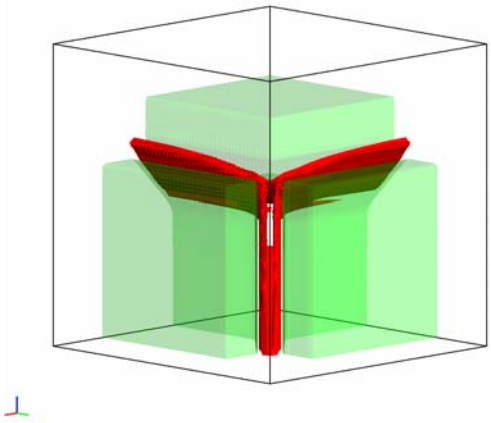


Рисунок 12. Изоповерхность температуры T=680ºK на момент времени 30мкс, деформация 13.5%

Инициирование детонации плоской волной.

Были рассмотрены три опыта, в которых детонация образца ПБС толщиной 20 мм возбуждалась плоской ударной волной [3]. Схема проведения этих экспериментов представлена на рисунке 20.

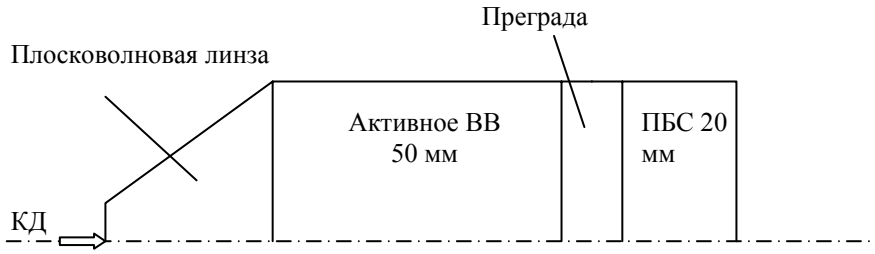


Рисунок 13- Схема экспериментов по инициированию детонации плоской волной. Диаметр экспериментальной сборки 60 мм

Измерялось полное время прохождения волны по металлической преграде и ПБС, из которого, после вычитания расчетного времени прохождения ударной волны по преграде, получалось время движения волны по ПБС. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными представлено в таблице 5.

Таблица 5 - Результаты моделирования плосковолновых экспериментов

Опыт	Активное ВВ	Преграда	Время прохождения волны по ПБС, мкс/ Средняя скорость, км/с	
			Расчет	Эксперимент [3]
1	ТГ	9 мм Al	2.62/7.64	2.67/7.49
2	Октоген	6 мм Cu	2.79/7.16	2.89/6.93
3	ТГ	6 мм Cu	3.66/5.47	3.75/5.33

Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными. Расхождение в средней скорости волны в ПБС составляет ~(2-3)%, что соизмеримо с влиянием неопределенностей уравнений состояний материалов, входящих в состав экспериментальной сборки, и вариаций ударно волновой чувствительности образцов ВВ одной партии. Такого же масштаба может быть методическая погрешность расчета с размазанным фронтом ударной волны – длина интервала счетной сетки составляет 2% от толщины слоя ПБС.

Кумулятивные заряды.

Для проверки работы программы в условиях больших деформаций использовались результаты опытов по кумулятивным зарядам, представленные в одном из докладов на VII Забабахинских научных чтениях 2003 года.

Рассматривается кумулятивный заряд длиной 40 мм, диаметром 32 мм. Начальная плотность ВВ 1.64 г/см^3, скорость детонации D=8 км/с. Медная облицовка толщиной 1 мм имеет форму сегмента. Инициирование ВВ производится в точке на оси симметрии заряда. С параметрами Y0=0.36 Гпа, β=0 расчет хорошо согласуется с опытом. Так на момент окончания расчета t=18.4 мкс от начала детонации наибольший диаметр струи составляет 6.7 мм, в опыте 7.2 мм, расчетная длина струи 55 мм, в опыте 54 мм. На рисунке 14 показано распределение плотности на последовательные моменты времени.

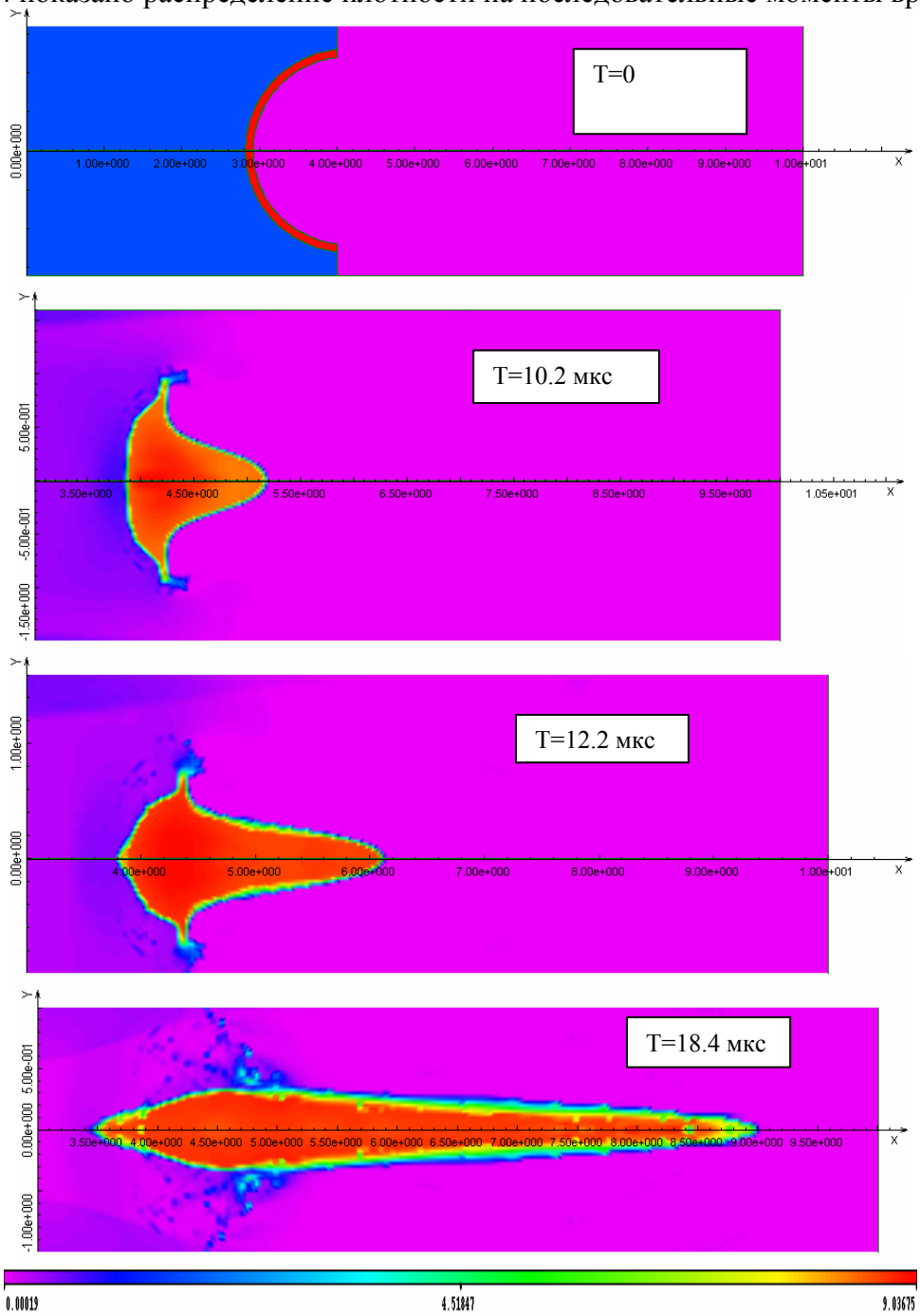


Рисунок 14. Распределение плотности

Транспортировка газа по трубопроводам.

В 1999-2000 годах методика ГРАД-МГ была применена для математического моделирования нестационарного течения природного газа по многониточному магистральному трубопроводу. Модуль расчета линейного участка трубопровода используется в компьютерной системе моделирования магистрального транспорта газа, разрабатываемой в РФЯЦ-ВНИИТФ /7/.

Расчет течения газа по линейному участку.

Рассматривается морской участок газопровода Россия-Турция: труба длиной 386.3 км, диаметр трубы равен 457 мм, коэффициент сопротивления λ=0.00918, коэффициент теплопередачи α=7. Температура воды T_e=8.9°C. УРС: идеальный газ, μ=16, γ=1.3. На входе давление газа 25 МПа, температура 37.8°C. На выходе давление 5.40 МПа.

Начальные условия: линейное распределение по граничным значениям.

Перепад глубин залегания трубопровода от 0 до 2200 м.

На графиках отображено распределение параметров течения по длине трубопровода:

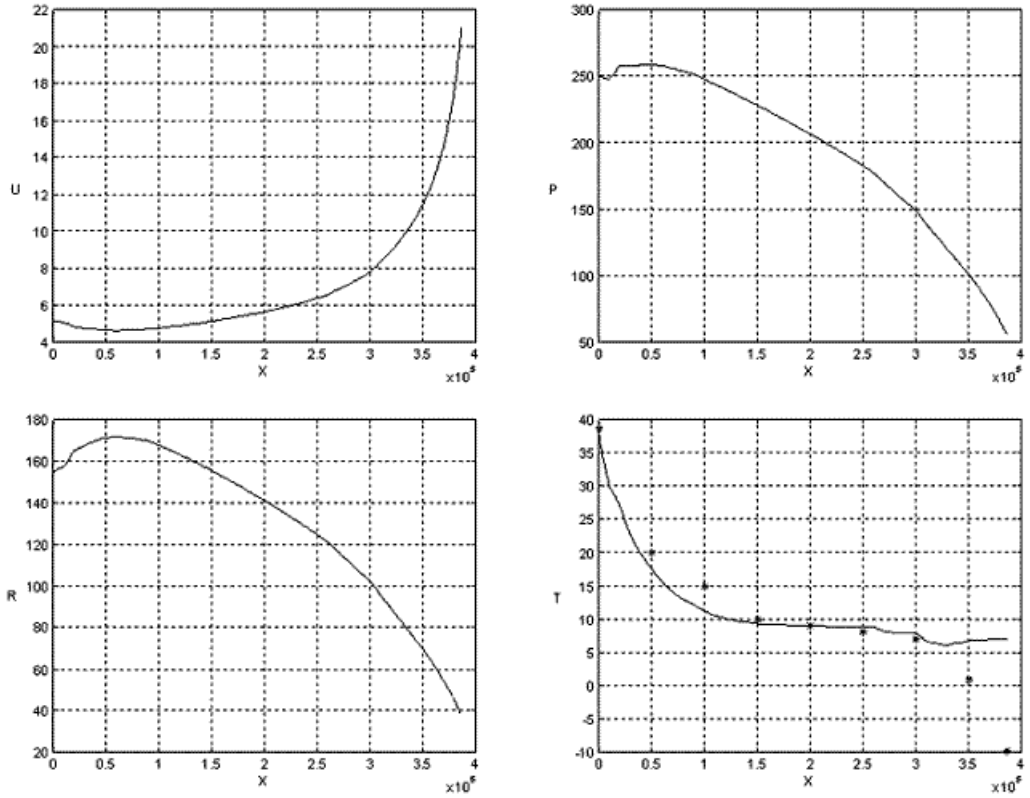


Рисунок 15.

Расчет течения газа по многониточному участку.

Рассматривается участок магистрального газопровода в районе компрессорной станции КС-18 “Мышкино-Граница объединения”, изображенный на рисунке 1. Длина четырех труб 75 км, длина 5-й трубы 37 км. Проходной диаметр 3–ей трубы 1.4 м, остальных труб 1.2 м. Шероховатость 0.03 мм (λ=0.00918). Температура грунта T_e=5°C. Коэффициенты теплообмена подбирались так, чтобы на выходных торцах труб получалась температура газа указанная на рисунке. УРС - идеальный газ с γ=1.3.

Диаметр перемычек 1.2 м, длина 50 м. Отвод (перемычка № 9) имеет длину 14.7 км, где задано давление 2.0 МПа. Все краны перемычек, кроме 12 и 16, закрыты. Линейные краны открыты. Плотность газа в нормальных условиях ρ_0=0.729277кг/см^3. Рассчитанные значения потоков, в сравнении с измеренными, приведены в следующей таблице и отличаются от измеренных на ±5%.

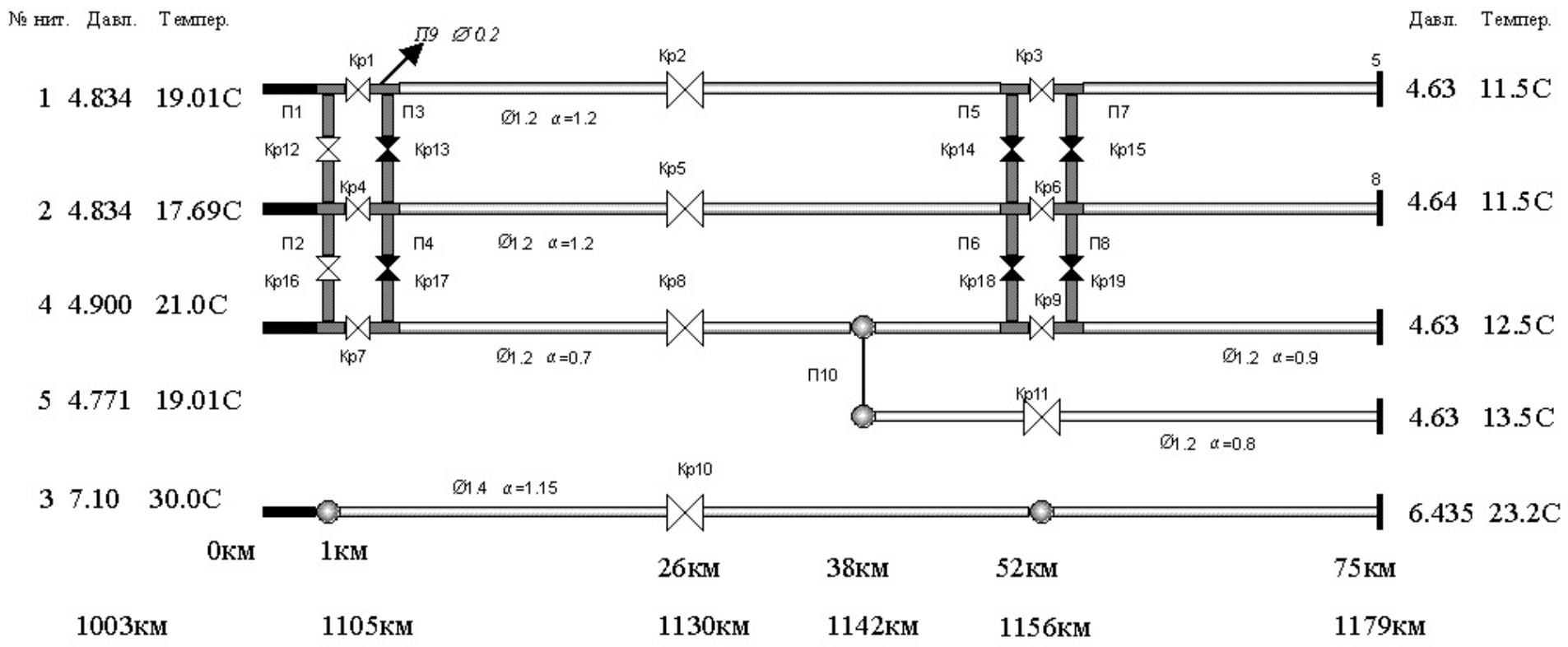


Рисунок 16. Схема моделируемого участка МГ (газ течет слева направо).

Поток газа осредненный по 4 суткам.

№ нитки	1	2	3	4	5	Отвод П9
Q SCADA	0.841	0.784	2.82	1.17		
Q расчет	0.875	0.826	2.79	1.11	0.555	0.07

1. B.A. Suchkov, A.S. Shnitko. Technique and Set of Programm GRAD for Solution of Nonstationary Problems of Continua Mechanics. Third Joint Conference on Computational Mathematics. Los Alamos, NM, USA, January 23-27, 1995.
2. Быченков В.А. и др. Методика расчета течения в кубических образцах, сжимаемых жесткими прессами. Отчет по проекту МНТЦ №2040. ГУП «Стрела», г. Снежинск, 2003 г.
3. Ю.А. Аминов, А.В. Вершинин, Н.С.Еськов и др. Исследование ударно-волновой чувствительности пластифицированного ВВ на основе ТАТБ. ФГВ, 1995, № 1, с. 103-108.
4. Гребенкин К.Ф. Полупроводниковая модель инициирования детонации ТАТБ. Труды международной конференции V ЗНЧ. 21-25 сентября 1998 г. С 189-194. Из. РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск,1999.
5. Tonks D.L. The data shop: A database of weak-shock constitutive data. LANL report LA–12068–MS, 1991.
6. А.Б. Глушак, С.А. Новиков. Сопротивление металлов пластической деформации при высокоскоростном сжатии. Химическая физика, 2000, т.19, №2, с. 65-69.
7. Анучин М.Г., Гагарин С.В. Игнатьев А.О., Калинин А.А., Кузнецов А.Н., Сучков В.А., Шнитко А.С. Нестационарная модель магистрального транспорта природного газа. Сборник тезисов докладов 1-й Международной научно – технической конференции DISCOM 2002. Развитие компьютерных комплексов моделирования управления технологическими процессами в газовой отрасли. Москва ноябрь 2002 г.