

На правах рукописи



Помыкалов Евгений Валерьевич

МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА
ОБРАЗОВАНИЯ ГОРЯЧИХ ТОЧЕК В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Челябинск – 2026

Работа выполнена в ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Яловец Александр Павлович

Официальные оппоненты: Рязских Виктор Иванович, доктор
технических наук, профессор, заведующий
кафедрой прикладной математики и
механики, ФГБОУ ВО «Воронежский
государственный технический
университет»

Радченко Павел Андреевич, доктор физико-
математических наук, доцент, научный
сотрудник лаборатории механики
структурно-неоднородных сред, ФГБУН
«Институт физики прочности и
материаловедения им. В.Е. Панина
Сибирского отделения Российской
академии наук»

Ведущая организация: ФГБУН «Объединенный институт высоких
температур Российской академии наук»

Защита состоится «05» мая 2026 г. в 14 часов 00 минут на заседании диссертационного совета 24.2.437.05 на базе ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)» по адресу: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, ауд. 1007.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)» и на сайте <https://www.susu.ru/ru/dissertation/24243705-d-21229814/pomykalov-evgeniy-valerevich>

Автореферат разослан « » февраля 2026 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук, профессор



Н.А. Манакова

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

Изобретение пороха в IX – X веках в Китае и последующее бурное развитие химии в XVIII–XIX веках привело к открытию новых высокоэнергетических соединений со взрывчатыми свойствами. Энергетические материалы (ЭМ) обладают значительным запасом химической энергии, высвобождаемой в ходе экзотермических реакций, что обуславливает потенциальную опасность их неконтролируемого воспламенения при внешних воздействиях. Научный интерес в области безопасного обращения ЭМ сформировался под влиянием ряда исторических предпосылок, связанных с развитием технологий, военными потребностями, промышленным применением и целого ряда разрушительных техногенных катастроф – от детонаций пороховых арсеналов и железнодорожных составов в позапрошлом столетии до недавних трагедий на современных промышленных объектах. Таким образом, исследование механизмов инициирования ЭМ, которыми являются конденсированные ВВ, представляет собой актуальную научную задачу, имеющую фундаментальное и прикладное значение для обеспечения безопасности и повышения эффективности их применения, особенно в условиях механических воздействий с низкой скоростью.

Большинство классических и современных исследований сфокусировано на условиях интенсивного ударного нагружения, обеспечивающего безотказное инициирование, в которых доминирует механизм образования очагов разогрева ЭМ за счет адиабатического сжатия газовых полостей. В то же время, низкоскоростные воздействия, типичные для многих реальных сценариев, развивающихся при транспортировке, хранении и при случайных инцидентах, остаются менее изученными. Основными диссипативными процессами, приводящими к формированию горячих точек в твердых ЭМ при низкоскоростных ударах, являются фрикционные механизмы, основанные на внешнем и внутреннем трении^{1,2}. Трение, как сухое, так и с образованием пластических или жидких прослоек, является одним из наиболее распространенных и опасных источников локального разогрева, поэтому наибольший акцент в обеспечении безопасности производства и применения ЭМ должен быть поставлен на глубокое понимание фрикционных механизмов воспламенения.

Подход, сочетающий экспериментальные данные с физико-математическим моделированием, является основой для научно обоснованного прогнозирования опасных ситуаций, разработки безопасных технологических процессов, конструкций оборудования и регламентов работы. Понимание того, что даже низкоскоростные воздействия, сопровождающиеся трением или пластической деформацией, могут при определенных условиях привести к образованию горячих точек и последующему воспламенению, является критически важным для минимизации рисков на всех этапах жизненного цикла ЭМ.

Степень разработанности темы

Качественная физическая картина процесса зажигания ЭМ при механическом воздействии заложена в классических работах Ф. Боудена, О. Гуртона¹ и А. Иоффе³,

¹ Bowden, F. P. Initiation of solid explosives by impact and friction: The influence of grit / F. P. Bowden, O. A. Gurton // Proceeding of the Royal Society of London, Series A. – 1949. – Vol. 198. – P. 337-349.

² Хасайнов, Б.А. Ударно-волновое инициирование пористых энергетических материалов и вязкопластическая модель горячих точек / Б. А. Хасайнов, А. В. Аттетков, А. А. Борисов // Химическая Физика. – 1996. – Т.15, №7. – С. 53-125.

³ Боуден, Ф. Быстрые реакции в твердых веществах / Ф. Боуден, А. Иоффе // М.: ИЛ. – 1962. – 244 с.

предложивших концепцию горячих точек. Развитие этой идеи Дж. Филдом позволило установить количественные связи между параметрами нагружения и порогом воспламенения.

Экспериментальная база для изучения чувствительности ЭМ к удару была существенно расширена благодаря разработке и стандартизации ряда методов испытаний. Наиболее известными среди них являются тесты Стивена, Тейлора, Сюзана. Исследования М. Картрайта, А. Левиса, С. Чидестера, Р. Густавсена, К. Вандерсалла, С. Гарвера, Р. Гарза, Ф. Гарсия, Б. Добратза, П. Кравфорда, К. Руана, К. Чена, Ф. Кристофера и других позволили накопить обширные данные о пороговых параметрах для различных классов ЭМ. Ключевым результатом является установление перехода от доминирования ударно-волновых механизмов, в которых преобладает схлопывание газовых полостей при высокоскоростных ударах (более 100 м/с) к преобладанию диссипативных процессов таких как пластический сдвиг и трение при низких скоростях (менее 100 м/с). Современные экспериментальные работы Г.В. Белова^{4,5} и его коллег экспериментально подтвердили ведущую роль фрикционного взаимодействия и образования зон локализованного сдвига в условиях низкоскоростного нагружения.

Теоретическое описание проблемы привело к созданию нескольких классов моделей:

- А. Баруа, С. Ким, Д. Ма, П. Чен и другие разработали критериальные модели, связывающие воспламенение с достижением критических размера и температуры горячих точек или модели с интегральными параметрами нагружения.
- Конститутивные модели механики материалов, не учитывающие химические реакции, были разработаны М. Кидо, Р. Расимором, Ф. Чабиным.
- Дж. Пауэрс, В. Лин, Б. Клементс разработали многофизические сопряжённые модели, объединяющие расчёт термомеханических полей и кинетику разложения.
- Микроструктурные и макрокинетические модели, акцентирующие роль неоднородностей, были описаны в работах Е. Велле, К.Ф. Гребёнкина, Р. Браунинга, Р. Скаммона, Ю.М. Клименко.

Отдельное направление составляют работы, посвящённые фрикционным механизмам, включая моделирование нагрева на контактной границе частиц ЭМ при сдвиговых деформациях (Дж. Кёртис и др.) и аналитические модели с учётом температурной зависимости трения (А.П. Амосов, С.А. Бостанджиян, В.С. Козлов).

Несмотря на значительный прогресс в исследовании механизмов инициирования ЭМ, количественное прогнозирование их поведения при сложных сценариях низкоскоростного нагружения остаётся недостаточно разработанным. Существующие подходы зачастую косвенно или вовсе не учитывают фрикционные механизмы на контактной границе между инертным материалом и энергетическим, что является ключевым фактором в подобных сценариях. Данное обстоятельство определяет необходимость дальнейших систематических исследований и развития комплексных физически обоснованных моделей.

⁴ Белов, Г. В. Условия инициирования взрывчатого превращения в образцах флегматизированного октогена при ударе низкоскоростными инденторами со сферическим торцом / Г. В. Белов, А. Н. Китин, Н. И. Шустова // Физика горения и взрыва. – 2020. – Т. 56, № 1. – С. 114-119.

⁵ Белов, Г. В. Влияние предварительного механического повреждения и пористости взрывчатого вещества на условия инициирования и параметры взрыва при низкоскоростном ударе / Г. В. Белов, Ю. Б. Базаров, С. Н. Васенин [и др.] // Физика горения и взрыва. – 2017. – Т. 53, № 2. – С. 126-132.

Целью работы является комплексное исследование процессов, приводящих к зажиганию ЭМ под воздействием низкоскоростных динамических нагрузок, с разработкой соответствующих математических методов, алгоритмов и их реализацией в виде комплекса программ.

Достижение поставленной цели потребовало решение следующих **задач**:

1. Анализ моделей образования горячих точек в ЭМ и обзор экспериментальных исследований.
2. Разработка математического метода моделирования поведения ЭМ под воздействием низкоскоростных динамических нагрузок.
3. Разработка численного метода для исследования температур на контактной поверхности между ЭМ и инертным ударником.
4. Разработка алгоритма оптимизации для решения обратной задачи определения прочностных характеристик ЭМ.
5. Разработка программного комплекса, моделирующего натурные эксперименты по низкоскоростному механическому воздействию инертного ударника на ЭМ с учетом локального повышения температуры в тонком слое исследуемого материала.
6. Проведение численных исследований для определения прочностных параметров ЭМ и установления факторов, приводящих к зарождению взрывчатого превращения в ЭМ.

Научная новизна

В области математического моделирования: разработан новый математический метод моделирования поведения ЭМ на основе модифицированной математической модели механики сплошных сред, позволяющий учитывать взаимодействие ударника с ЭМ, а также процессы, происходящие в тонком слое ЭМ на контактной границе с ударником.

В области численных методов: разработан оригинальный численный метод расчета температур в тонком слое ЭМ на контактной границе с ударником. Разработан алгоритм оптимизации для решения обратной задачи определения прочностных параметров ЭМ на основе натурных экспериментов, которые используются в программном комплексе для исследования поведения ЭМ под воздействием низкоскоростных механических нагрузок.

В области комплексов программ: разработан программный комплекс, реализующий предложенные модели и методы, позволяющий исследовать поведение ЭМ и механизм образования горячих точек в тонком слое ЭМ на контактной границе с ударником.

Теоретическая значимость работы заключается в разработке нового математического метода моделирования поведения ЭМ при воздействии механических нагрузок, а именно, низкоскоростного удара. Данный метод позволяет исследовать локальное повышение температуры на контактной поверхности ЭМ и ударника, прогнозировать появление горячих точек и определять условия зажигания ЭМ. Кроме того, в работе разработан алгоритм оптимизации, который позволяет определять прочностные параметры ЭМ на основе натурных экспериментов. Полученные результаты вносят вклад в развитие теории образования горячих точек в ЭМ.

Практическая значимость работы заключается в возможности применения разработанного программного комплекса при решении задач, связанных с безопасным обращением взрывчатых веществ, а именно, позволяет исследовать фрикционный механизм образования горячих точек и давать оценку условий инициирования энергетического материала, что имеет важное значение при планировании и подготовке экспериментов на безопасность на производстве. Прочностные параметры ЭМ, определенные с применением разработанного алгоритма оптимизации, могут

применяться при решении научных и практических задач, связанных с исследованием свойств ЭМ.

Реализация и внедрение. Результаты диссертационного исследования обладают научной новизной, а также практической значимостью, о чем свидетельствует акт о внедрении от ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина» (г. Снежинск).

Получено свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2025690332 от 06.11.2025 г.

Методология и методы диссертационного исследования. *Объектом исследования* является поведение ЭМ под воздействием механических нагрузок. *Предметом исследования* является механизм образования горячих точек в ЭМ на основе метода математического моделирования поведения ЭМ под воздействием механических нагрузок.

При решении поставленных задач в работе использовались методы математического моделирования, численные методы механики сплошных сред и вычислительной математики. Результаты численных экспериментов сопоставлены с результатами натурных экспериментов. Программная реализация предложенных методов и алгоритмов выполнялась с использованием языков программирования FORTRAN и Python.

Положения, выносимые на защиту в соответствии с паспортом научной специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ:

– *в рамках реализации эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента:* программный комплекс для проведения вычислительного эксперимента по воздействию механических нагрузок на ЭМ на основе предложенного математического метода. Программный комплекс позволяет исследовать поведение ЭМ и локальное повышение температуры на контактной поверхности с ударником [3, 4, 7, 9];

– *в рамках разработки новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели:* математический метод моделирования натурального эксперимента, который описывает низкоскоростное взаимодействие инертного ударника с ЭМ и позволяет исследовать локальное повышение температуры на контактной поверхности за счет силы трения между ударником и ЭМ; численный метод, который позволяет проводить расчет температур в тонком слое ЭМ на контактной границе с ударником на основе аналитического решения; алгоритм оптимизации, который позволяет определить прочностные характеристики ЭМ по данным натурального эксперимента [1, 4 – 6];

– *в рамках комплексных исследований научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента:* комплексное исследование процесса образования горячих точек в тонком слое ЭМ на контактной границе с ударником и условий, приводящих к зажиганию ЭМ под воздействием низкоскоростных динамических нагрузок с применением математического моделирования и вычислительного эксперимента на основе натурального эксперимента [2 – 4, 5, 8].

Степень достоверности результатов. В основе математического моделирования лежит хорошо известная математическая модель упругопластических течений в деформируемых твердых телах, дополненная математической моделью взаимодействия инертного тела со взрывчатым веществом с учетом трения на контактной поверхности. Полученные теоретические результаты хорошо согласуются с результатами натурных экспериментов.

Апробация работы. Основные результаты исследования представлены на международных конференциях: XV «Забабахинских научных чтениях» (Россия, Снежинск, 2021 г.), XL Fortov International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Россия, Терскол, 2025 г.), и всероссийских конференциях: XIII Всероссийской конференции «Научная сессия НИЯУ МИФИ» по направлению «Инновационные ядерные технологии» (Россия, Снежинск, 2025 г.), 29 Всероссийская конференция по численным методам решения задач теории упругости и пластичности (Россия, Челябинск, 2025 г.). Результаты работы обсуждались на научных семинарах кафедры вычислительной механики ЮУрГУ (Челябинск, 2019 – 2024 гг.), расширенном семинаре кафедры вычислительной механики ЮУрГУ (Челябинск, 2025 г.).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 9 работ. Из них 3 в ведущих рецензируемых изданиях: одна в зарубежном журнале, индексируемого в наукометрических базах Web of Science и Scopus [2], две статьи в ведущих российских журналах из Перечня ВАК при Минобрнауки России [1, 3], а также 1 программа зарегистрирована в Реестре программ для ЭВМ Федеральной службы по интеллектуальной собственности Российской Федерации [9]. В совместных публикациях научному руководителю принадлежит постановка задач. Из работ, выполненных в соавторстве, в диссертацию включены результаты, полученные лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, словаря терминов, списка литературы и приложений. Полный ее объем составляет 170 страниц печатного текста, включая 89 рисунков, 6 таблиц, список литературы из 90 наименований, 2 приложения.

Краткое содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы исследования, описывается степень разработанности темы, сформулированы цели и задачи работы, показаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость результатов. Изложены основные положения, выносимые на защиту, методология и методы исследования, описана степень достоверности полученных результатов, приводятся сведения об апробации работы, структура и объем диссертации.

В первой главе представлен обзор современных моделей образования горячих точек в ЭМ при механических воздействиях и анализ экспериментальных методов их исследования. В первом параграфе рассмотрены механизмы воспламенения и образования горячих точек. Анализируются классические и современные модели, включая адиабатическое сжатие газовых включений, вязкопластическую диссипацию энергии и фрикционный нагрев.

Второй параграф содержит обзор методов экспериментальных исследований чувствительности ЭМ, таких как тесты Стивена, Тейлора и Сьюзан. Описаны современные экспериментальные установки, диагностические средства (высокоскоростная съёмка, инфракрасная термография, датчики давления) и ключевые результаты, полученные в исследованиях динамики удара, а также влияния микроструктуры и старения материалов на их чувствительность.

Третий параграф посвящён математическому моделированию и численным методам описания механизмов образования горячих точек. Рассмотрены численные методы термомеханического сопряжения на неструктурированных полигональных сетках, основанные на нелинейной вязкоупругой модели, а также методы, включающие в себя различные модели зажигания. Также рассмотрены критерии воспламенения, основанные на пластической работе, размере и температуре горячих точек, а также комплексные гидродинамические и термомеханические модели.

В четвертом параграфе сделан вывод о необходимости разработки методов математического моделирования, способных прогнозировать инициирование взрывов в широком диапазоне условий. Подчеркивается важность интеграции экспериментальных и вычислительных методов для углублённого понимания физико-химических процессов в энергетических материалах.

Вторая глава посвящена разработке математического метода моделирования взаимодействия инертного тела (ударника) с ЭМ при низкоскоростном ударном воздействии, сформулированы основные разработанные элементы метода: самосогласованная модель взаимодействия ударника и ЭМ, математическая модель деформируемого образца ЭМ, дополненная моделью пластичности и уравнением состояния, граничными условиями и моделью образования тонкого слоя на контактной границе с фазовым переходом. Метод в целом позволяет моделировать динамику процесса, эволюцию полей напряжений, температуры и других параметров, что необходимо для анализа условий образования горячих точек.

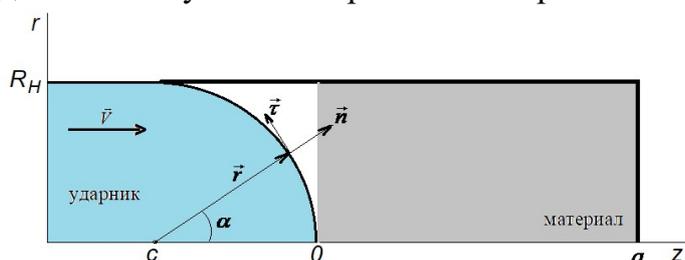


Рисунок 1 – Схема эксперимента по воздействию стального ударника на ЭМ

Первый параграф содержит постановку задачи, в которой стальной ударник цилиндрической геометрии, правый торец которого представляет собой полусферу радиуса R_H , движется со скоростью \vec{V} ($V_r = 0, V_z = V$) и сталкивается с энергетическим материалом, заключенным в цилиндрическую капсулу (рис. 1). Масса ударника равна

M . Также в параграфе приводится обоснование фундаментальных допущений механики сплошной среды, применяемых для моделирования физического процесса.

Сформулирована самосогласованная модель взаимодействия ударника и ЭМ. Уравнение движения ударника записано в виде второго закона Ньютона:

$$M \dot{V} = F_r(t), \quad (1)$$

где $F_r = 2\pi \int_0^{r_c} \Sigma_z(r) r dr$ – сила, действующая на погруженную в материал поверхность ударника, $\Sigma_z = \sigma_{zz}n_z + \sigma_{zr}n_r$ – поверхностная сила, σ_{ik} – компоненты тензора напряжений материала, \vec{n} ($n_r = \sin \alpha, n_z = \cos \alpha$) – нормаль к поверхности ударника, r_c – координата границы контакта материала с ударником, M – масса ударника.

Уравнение (1) решается в два этапа: на первом этапе интегрируется в предположении, что сила остается постоянной, т.е. ударник движется с постоянным ускорением на малом интервале времени; а на втором этапе происходит учет изменения кинетической энергии за счет работы силы трения. Таким образом, сформулирована самосогласованная модель взаимодействия ударника и ЭМ. Выражение, описывающее движение ударника с учётом силы взаимодействия с материалом и работы силы трения имеет вид

$$V(t + \Delta t) = \sqrt{\left(V(t) + \frac{F_r}{M} \Delta t \right)^2 - \frac{4\pi}{M} \Delta t \int_0^{r_c} q_f r dr}, \quad (2)$$

q_f – тепловой поток, возникающий за счет работы силы сухого трения.

Во втором параграфе представлена математическая модель деформируемого образца ЭМ. Сформулирована система уравнений механики сплошной среды, описывающая упругопластические течения, в переменных Лагранжа в цилиндрической системе координат:

$$\begin{aligned}
\dot{\rho} &= -\rho\dot{V}/V, \quad \dot{V} = V(v_{rr} + v_{\phi\phi} + v_{zz}); \\
\rho\dot{v}_r &= \frac{\partial\sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{\partial S_{rz}}{\partial z} + \frac{S_{rr} - S_{\phi\phi}}{r}, \quad \rho\dot{v}_z = \frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z} + \frac{\partial S_{zr}}{\partial r} + \frac{S_{zr}}{r}; \\
\rho\dot{U} &= -P\dot{V}/V + (S_{rr}v_{rr} + S_{\phi\phi}v_{\phi\phi} + S_{zz}v_{zz} + 2S_{rz}v_{rz}) - (\nabla\bar{q}); \\
\dot{S}_{rr}^0 &= 2\mu(v_{rr} - \dot{V}/3V); \quad \dot{S}_{zz}^0 = 2\mu(v_{zz} - \dot{V}/3V); \quad \dot{S}_{\phi\phi}^0 = -\dot{S}_{rr}^0 - \dot{S}_{zz}^0; \quad \dot{S}_{rz}^0 = 2\mu v_{rz},
\end{aligned} \tag{3}$$

где ρ , v_i – массовые плотность и скорость, v_{ik} – тензор скоростей деформаций, V – объём, σ_{ik} – неравновесный тензор напряжений, P, S_{ik} – шаровая часть и девиатор тензора напряжений, U – удельная внутренняя энергия единицы массы, T – температура, $\bar{q} = -\varkappa\nabla T$ – тепловой поток, описываемый законом Фурье, \varkappa – коэффициент теплопроводности.

Система (3) дополняется моделью пластичности, термическим $P = P(\rho, T)$ и калорическим $U = U(\rho, T)$ уравнениями состояния ЭМ, а также начальными и граничными условиями. Обоснован выбор упругопластической модели Прандтля – Рейса. Показано, что данная модель адекватно описывает вязкопластическое поведение молекулярных кристаллов, к классу которых относятся многие ЭМ. Разработано полуэмпирическое уравнение состояния (УРС) ЭМ для молекулярных кристаллов, разделяющее давление и внутреннюю энергию на «холодную» и тепловую составляющие. Параметры данного УРС определены на основе экспериментальных данных по изотермическому сжатию β -октогена.

Третий параграф описывает режимы взаимодействия на контактной границе ударника и ЭМ: режим полного увлечения (прилипания) и режим обтекания с учётом трения на контактной границе. Для режима обтекания выведены граничные условия, учитывающие изменение скорости материала на поверхности ударника и работу силы сухого трения.

Четвёртый параграф содержит математическую модель локального разогрева в тонком приповерхностном слое ЭМ за счёт фрикционного нагрева. Представлена модель, описывающая два этапа:

1. Этап нагрева. На данном этапе, соответствующему режиму сухого трения, происходит разогрев контактной границы до достижения температуры фазового перехода (плавления) ЭМ. Тепловые потоки, распространяющиеся в железный ударник и ЭМ рассчитываются из условия равенства температур на контактной поверхности. Для описания нагрева поверхностей при сплошном фрикционном контакте используется точное аналитическое решение уравнения теплопроводности.

Введена зависимость коэффициента трения от доли расплавленного материала, что позволяет описывать переход от сухого к вязкому трению с учетом стадии плавления тонкого слоя ЭМ на контактной границе:

$$k_f(Q) = \begin{cases} k_0, & Q < Q_1; \\ k_0 \frac{Q_m - Q}{Q_m - Q_1}, & Q_1 \leq Q < Q_m; \\ 0, & Q \geq Q_m, \end{cases} \tag{4}$$

где $Q_1 = 0,9 \cdot Q_m$, k_0 – коэффициент сухого трения, Q – тепло, поглощенное тонким слоем ЭМ, Q_m – количество теплоты на единицу площади трущихся поверхностей, необходимое для полного плавления тонкого слоя.

2. Этап охлаждения. На данном этапе наступает режим вязкого трения после формирования расплавленного тонкого слоя в ЭМ, либо в случае разгрузки некоторого участка контактной поверхности. Дальнейшая термодинамическая эволюция

контактной зоны определяется процессами теплоотвода в глубину материалов за счет теплопроводности.

Третья глава посвящена описанию численных методов, которые позволяют реализовать математические модели, разработанные для описания динамики процесса взаимодействия инертного тела и энергетического материала, а также описание алгоритма оптимизации для решения обратной задачи поиска прочностных параметров ЭМ на основе экспериментальных данных.

В первом параграфе представлен численный метод для расчета упругопластических течений. Метод основан на интегральной формулировке уравнений механики сплошной среды и использовании неравновесных напряжений, которые обеспечивают выполнение второго закона термодинамики⁶.

Во втором параграфе разработан оригинальный численный метод для эффективного расчета температур на контактной поверхности между ударником и ЭМ. Метод позволяет избежать затратного конечно-разностного решения уравнения теплопроводности в тонком слое ЭМ путем использования точного аналитического решения уравнения теплопроводности:

$$T_{surf}(t) - T_0 = \frac{\chi_2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{q_2(t')}{\sqrt{\chi_2(t-t')}} dt' = \frac{\chi_2}{\sqrt{\pi}} \left(\sum_{n'=1}^n \int_{t_{n'-1}}^{t_{n'}} \frac{q_2(t')}{\sqrt{\chi_2(t-t')}} dt' + \int_{t_n}^t \frac{q_2(t')}{\sqrt{\chi_2(t-t')}} dt' \right). \quad (5)$$

Формула (5) требует знания теплового потока за всю историю нагружения. Мгновенное значение теплового потока зависит главным образом от силы прижатия ЭМ к стальному ударнику. Ввиду нерегулярного характера изменения силы прижатия фиксация тепловых потоков требует хранения данных на подробной расчетной сетке, что существенно затрудняет вычислительный процесс.

Ниже представлен алгоритм расчета температур на контактной поверхности между ударником и ЭМ, основанный на дроблении временного интервала интегрирования, который устраняет необходимость хранения полной истории теплового потока, снижает вычислительные затраты и повышает точность расчета.

Алгоритм расчета температур на контактной поверхности подразумевает следующее:

Шаг 1. На временном интервале $(0 - t_{\max})$, для которого производится расчет температуры поверхности, задается расчетная сетка $0, t_1, t_2 \dots t_n$.

Шаг 2. Производится расчет температуры поверхности на каждый малый момент времени по формуле (5).

Шаг 3. Рассчитывается средний тепловой поток на малом временном интервале: $\bar{q}_2(t_{n'-1/2}) = \int_{t_{n'-1}}^{t_{n'}} q_2(t') dt' / (t_{n'} - t_{n'-1})$.

Шаг 4. Вычисляются температуры поверхности на всем интервале времени:

$$T_{surf}(t) = T_0 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\sum_{n'=1}^n \bar{q}_2(t_{n'-1/2}) \left(\sqrt{\chi_2(t-t_{n'-1})} - \sqrt{\chi_2(t-t_{n'})} \right) + \bar{q}_2(t_n) \sqrt{\chi_2(t-t_n)} \right).$$

Таким образом разработанный алгоритм обеспечивает корректный расчет всей выделившейся тепловой энергии обусловленной работой силы трения.

В третьем параграфе разработан алгоритм оптимизации для решения задачи определения прочностных параметров ЭМ – предела текучести Y и модуля сдвига μ , необходимых для корректного математического моделирования поведения ЭМ в программном комплексе. Для минимизации среднеквадратичного функционала невязки между результатами численного моделирования и натурального эксперимента

⁶ Яловец, А. П. Расчет течений среды при воздействии интенсивных потоков заряженных частиц / А.П. Яловец // ПМТФ. – 1997. – № 1. – С. 151–166.

выбран и обоснован метод Нелдера – Мида (симплекс-метод). Алгоритм оптимизации содержит следующие шаги:

Шаг 1. Инициализируются параметры предела текучести Y и модуля сдвига μ в начальном приближении.

Шаг 2. Данные параметры записываются в управляющий файл разработанного программного комплекса.

Шаг 3. Автоматически запускается программный комплекс для моделирования низкоскоростного механического воздействия на ЭМ.

Шаг 4. Вычисляется среднеквадратическое отклонение между траекториями движения ударника рассчитанной численно и полученной в соответствующем натурном эксперименте.

Шаг 5. Выполняется оптимизация с помощью метода Нелдера – Мида, в результате которой подбирается новый набор параметров.

Шаг 6. Выполняется проверка сходимости метода.

Шаг 7. При достижении заданной сходимости выполняется вывод оптимальных параметров.

Преимуществами метода Нелдера – Мида для задачи определения прочностных параметров ЭМ являются отсутствие необходимости вычисления градиента целевой функции, эффективность для малой размерности пространства параметров и относительно быстрая сходимость при ограниченных вычислительных ресурсах.

Четвертая глава посвящена разработке и применению программного комплекса для моделирования низкоскоростного механического воздействия на ЭМ с учётом локального разогрева, а также решению обратной задачи идентификации прочностных параметров ЭМ и анализу условий его зажигания.

В первом параграфе описан разработанный комплекс программ на языке программирования FORTRAN, предназначенный для моделирования удара инертного ударника по ЭМ с учётом тепловыделения в тонком поверхностном слое ЭМ. Реализованный программный комплекс включает в себя все математические модели и численные методы, описанные в главах 2 и 3. Приведена структура комплекса, включающая модули ввода данных, построения сетки, решения уравнений механики сплошной среды, расчёта температуры в зоне контакта, расчет изменения кинетической энергии ударника и вывода результатов. Особое внимание уделено оптимизации работы с памятью и возможности продолжения расчёта.

Во втором параграфе представлено описание программы на языке программирования Python для решения обратной задачи оптимизации – определения прочностных параметров ЭМ (предела текучести и модуля сдвига) путём минимизации отклонения между результатами моделирования и экспериментальными данными. Использован метод Нелдера – Мида, показана сходимость алгоритма к единственному набору параметров, что подтверждает определение глобального минимума целевой функции.

В третьем параграфе проведено тестирование программного комплекса на задаче об ударе медного стержня о жёсткую преграду (тест Тейлора). В качестве эталонного решения используются экспериментальные данные по конечной длине стержня в зависимости от скорости удара (табл. 1). Рассчитанная длина стержня хорошо согласуется с экспериментальными данными⁷, что подтверждает корректность реализации численного метода (относительная погрешность не превышает 2%).

⁷ Янилкин, Ю.В. Тесты для гидрокодов, моделирующих ударноволновые течения в многокомпонентных средах: Учебное пособие: в 2 т. / [Ю.В. Янилкин и др.]. – Саров: ФГУП «РФЯЦ–ВНИИЭФ». – 2018.

Таблица 1. Сравнение с экспериментом

v_0 , м/с	Конечная длина, мм (эксперимент ⁷)	Конечная длина, мм (численный расчет)	Относительная погрешность, %
110	90	90,03	0,03
158	82	81,75	0,3
205	72	72,51	0,7
250	62	63,33	2,14

В четвертом параграфе описаны натурные эксперименты по внедрению сферического ударника в октогенсодержащий ЭМ. Представлена схема и описание экспериментальной установки, также указаны характеристики исследуемого образца и ударника. В эксперименте регистрировались скорость железного ударника, глубина проникновения и реакция ЭМ. Результаты натурных экспериментов представлены в табл. 2.

Таблица 2. Экспериментальные данные

№ эксперимента	Скорость сферического ударника, м/с	Глубина внедрения сферического ударника, мм	Результат
1	13	3,3	взрыва нет
2	28,65	4,83	взрыв есть
3	30,2	5,31	взрыв есть
4	29	5,40	взрыв есть
5	Не указана	3,08	взрыва нет
6	15,41	3,15	взрыва нет

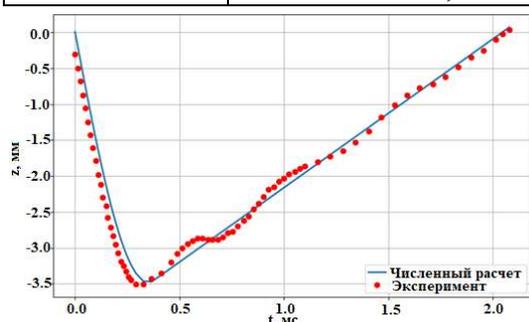


Рисунок 2 – Сравнение динамики погружения ударника для эксперимента №6.

параметры ЭМ: предел текучести $Y = 58,94$ МПа и модуль сдвига $\mu = 39,49$ ГПа. Результат численной оптимизации представлен на рис. 2.

В пятом параграфе проведено численное исследование температурных полей в зоне контакта для двух режимов: с учётом трения и без него. Температурные поля, полученные в эксперименте №1, представлены на рис. 3. Отличительной особенностью данного опыта является отсутствие взрывного процесса. На рис. 3А представлено распределение температур в объеме ЭМ при режиме взаимодействия без учета работы силы трения на контактной границе. Максимальная температура составляет 354 К. На рис. 3Б представлено распределение температур в объеме ЭМ для режима с учетом работы силы трения. Максимальная температура составляет 374 К. Сравнение двух режимов показало, что, нагрев материала за счет пластической деформации на 20 К меньше, чем при учете работы силы трения. Отметим, что температура в центре кратера практически близка к температуре при нормальных условиях (300 К). На рис. 3В представлено распределение температур на контактной поверхности в тонком слое равном 1 мкм при коэффициенте трения равном 0,3. Радиус кратера, полученный в ходе взаимодействия со сферическим ударником ~15 мм.

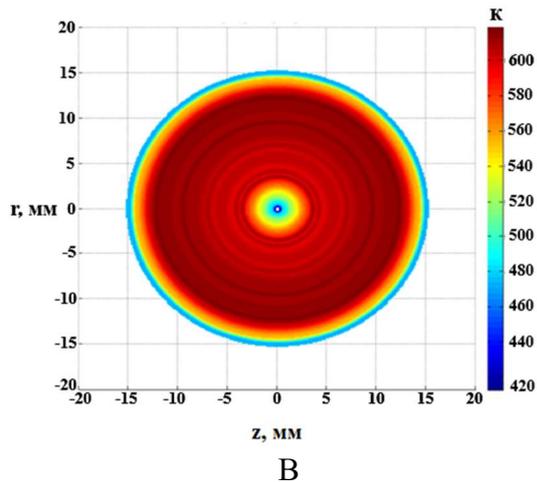
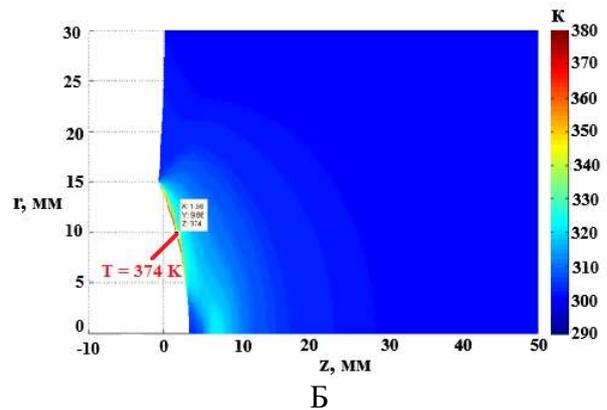
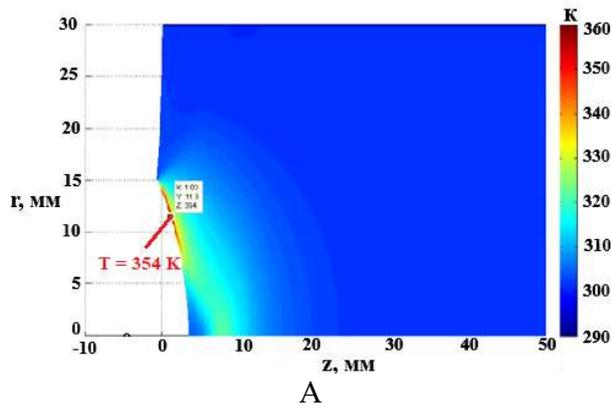


Рисунок 3 – Температурные поля в объеме и на контактной границе для эксперимента №1

На момент времени 0,4 мс температура ЭМ достигает температуры большей температуры плавления, и, в то же время, происходит освобождение ЭМ от нагрузки со стороны сферического ударника, что влечет за собой релаксацию материала и, соответственно, накопленная температура начинает распространяться в окружающую среду и, следовательно, ЭМ остывает.

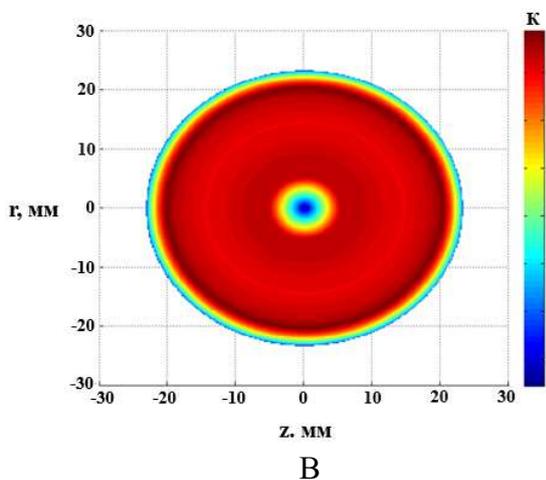
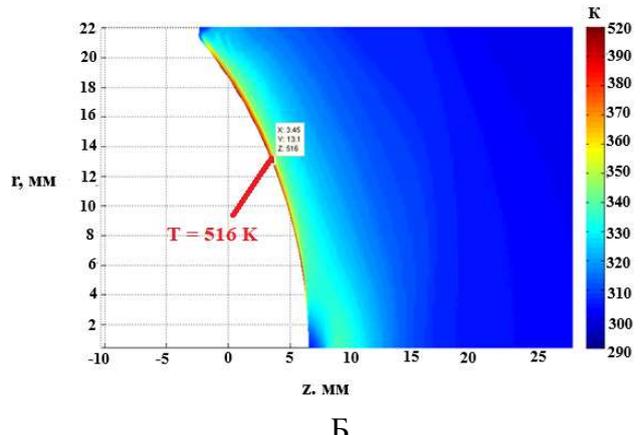
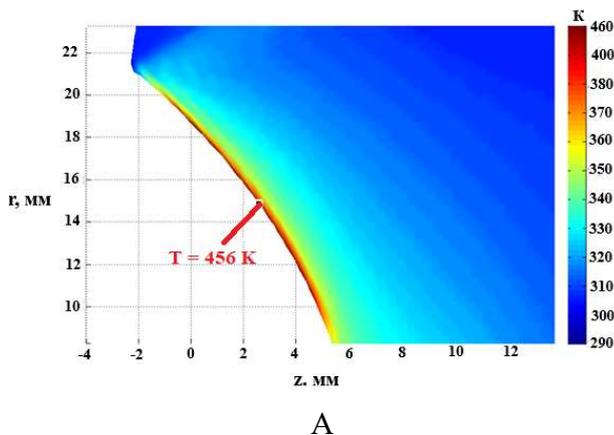


Рисунок 4 – Температурные поля в объеме и на контактной границе для эксперимента №3

Температурные поля, полученные в эксперименте №3, представлены на рис. 4. Отличительной особенностью данного опыта является регистрация взрывного процесса. Качественно результаты согласуются с экспериментом №1. Температуры близкие к контактной границе в объеме ЭМ составляют 456 К (рис. 4А) и 516 К (рис. 4Б) для режимов без учета силы трения и с его учетом, соответственно. На рис. 4В представлено распределение тем-

температур на контактной поверхности в тонком слое равном 1 мкм. На момент времени 0,4 мс температура ЭМ достигает температуры превышающей температуру плавления (552 К). Радиус кратера, полученный в ходе взаимодействия с сферический ударником ~ 23 мм.

На рис. 3 и 4 показано что, нагрев, обусловленный трением, является доминирующим механизмом, приводящим к достижению температур выше точки плавления ЭМ в тонком поверхностном слое. По результатам численных расчетов были определены угловые размеры кольцевой области разогрева, согласующиеся с литературными данными⁴.

В шестом параграфе проведено математическое моделирование и проанализированы условия зажигания ЭМ. Установлено, что для инициирования необходимы два условия: достижение критической температуры в зоне контакта и адиабатический режим (отсутствие интенсивного теплоотвода). Для экспериментов со взрывом (№2 – 4) рассчитан адиабатический период индукции ($\sim 0,11$ мс), что соответствует наблюдаемому в натуральных экспериментах воспламенению. Температура на контактной границе и период индукции для эксперимента №3 представлены на рис. 5.

В результате моделирования натуральных экспериментов без взрыва (№ 1, 5 и 6) получено, что температура не достигла критического уровня, так как был реализован изотермический режим из-за отскока ударника. Таким образом, невыполнение термического критерия в данных опытах является прямым следствием недостаточного энерговклада, что исключает возможность формирования активных горячих точек. Данный результат подтверждает отсутствие взрыва в натуральных экспериментах. Температура контактной границы для эксперимента №1 представлена на рис. 5.

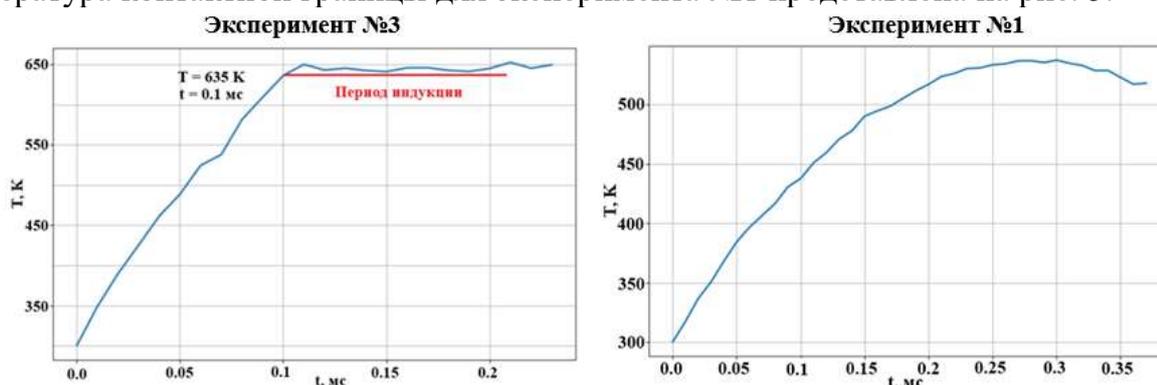


Рисунок 5 – Зависимость максимальной температуры в тонком слое ЭМ от времени для экспериментов № 3 и № 1

В заключительной части сформулированы рекомендации по снижению чувствительности ЭМ к низкоскоростным ударам, а именно, путем изменения компонентного состава, который влияет на прочностные характеристики и антифрикционные свойства ЭМ, а также путем оптимизации геометрии узлов контакта и режимов механического воздействия.

Заключение

В диссертационной работе подведены итоги выполненного исследования, а именно: 1) показана необходимость изучения механизмов и условий возникновения горячих точек при механических воздействиях на ЭМ. А также необходимость разработки математических моделей и методов для детального изучения механизмов образования горячих точек, особенно при низкоскоростных воздействиях, математические методы исследования которых практически отсутствуют; 2) разработан математический метод моделирования поведения ЭМ на основе модифицированной математической модели механики сплошных сред, который позволяет учитывать изменение кинетической энергии ударника за счет изменения внутренней энергии ЭМ и работу силы трения; 3) разработан численный метод для исследования температур

на контактной поверхности между ЭМ и инертным ударником, отличительной особенностью которого является использование аналитического решения, что позволяет повысить точность решения и оптимизировать расчет; 4) разработан и реализован алгоритм для решения обратной задачи оптимизации определения прочностных параметров ЭМ, отличительной особенностью которого является использование результатов натуральных экспериментов по динамике нагружения исследуемого материала; 5) разработан программный комплекс для моделирования поведения ЭМ на основе натуральных экспериментов по низкоскоростному механическому воздействию инертного ударника на ЭМ с учетом локального повышения температуры в тонком слое исследуемого материала; 6) установлены факторы, которые приводят к зарождению взрывчатого превращения в ЭМ при низкоскоростном механическом ударе. Показано, что сила трения, возникающая на контактной границе ударника и ЭМ, приводит к существенному повышению температуры в локальных областях – горячих точках. По результатам вычислительных экспериментов можно определить области локального повышения температуры; 7) результаты вычислительных экспериментов позволяют сформулировать рекомендации по снижению чувствительности ЭМ при низких скоростях воздействия, а именно, путем изменения компонентного состава, который влияет на прочностные характеристики и антифрикционные свойства ЭМ, а также путем оптимизации геометрии узлов контакта и режимов механического воздействия.

В результате диссертационной работы проведено комплексное исследование процессов, приводящих к зажиганию ЭМ под воздействием низкоскоростных динамических нагрузок на основе нового математического метода моделирования поведения ЭМ, который позволяет учитывать взаимодействие ударника с ЭМ, а также процессы, происходящие в тонком слое ЭМ на контактной границе с ударником. Для этого разработан численный метод расчета температур в тонком слое ЭМ на контактной границе с инертным ударником и алгоритм оптимизации для решения обратной задачи определения прочностных параметров ЭМ на основе натуральных экспериментов. На основе предложенного метода разработан программный комплекс, который позволяет исследовать поведение ЭМ и механизм образования горячих точек в тонком слое ЭМ.

Основные публикации автора по теме диссертации

Статьи, опубликованные в ведущих российских рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК при Министерстве науки и высшего образования РФ, и в рецензируемых научных журналах и изданиях, индексируемых Scopus и Web of Science:

1. Ковалев, Ю.М. Моделирование разогрева энергетических материалов / Ю.М. Ковалев, **Е.В. Помыкалов**, О.А. Шершнева // Вестник ЮжноУральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2022. – Т. 14, № 2. – С. 72–79. (RSCI, K2).

2. Kovalev, Yu. M. Equations of state for calculating the pressures of shockwave compression of pentaerythritol tetranitrate (PETN) / Yu. M. Kovalev, **E. V. Pomykalov** // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2023. – Vol. 96, No. 4. – P. 1052–1059. (Scopus (Q2), Web of Science (Q4)).

3. Ковалев, Ю.М. Определение упругих констант энергетических материалов на основе экспериментальных данных по механическому воздействию / Ю.М. Ковалев, М.А. Лебедев, В.П. Маташ, **Е.В. Помыкалов**, А.П. Яловец // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2025. – Т. 17, № 2. – С. 60–68. (ВАК, K2).

Другие научные публикации

4. **Pomykalov, E.V.** Numerical study of the frictional initiation mechanism of energetic materials under low-velocity impact / E. V. Pomykalov // Journal of Computational and Engineering Mathematics. – 2025. – Vol. 12, No. 4. – P. 19 – 32.

5. Ковалев, Ю.М. Математическая модель образования «горячих точек» в энергетическом материале при низкоскоростном ударе / Ю.М. Ковалев, **Е.В. Помыкалов**, А.П. Яловец // XXIX Всероссийская конференция по численным методам решения задач теории упругости и пластичности. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2025. – С. 45 – 46.

6. **Pomykalov, E.V.** Mathematical modeling of ignition of high explosives / E.V. Pomykalov, Yu.M. Kovalev, A.P. Yalovets // XL Fortov International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. – P.154

7. **Помыкалов, Е. В.** Определение упругих констант энергетического материала на основании экспериментальных данных / Е. В. Помыкалов, Ю. М. Ковалев, А. П. Яловец // Всероссийская научно-практическая конференция, посвященная 80-летию атомной промышленности. – Снежинск: Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, 2025. – С. 99 – 102.

8. **Помыкалов, Е. В.** Построение уравнения состояния эпоксидной смолы на основании экспериментальных данных по ударно-волновому нагружению / Е. В. Помыкалов, Ю. М. Ковалев // XV Международная конференция Забабахинские научные чтения. – Снежинск: Издательство РФЯЦ – ВНИИТФ, 2021. – С. 135.

Свидетельства о регистрации программ

9. **Помыкалов, Е.В.** Программа для определения условий зажигания взрывчатых веществ при механических воздействиях: Свидетельство № 2025690332 / **Помыкалов Е.В.**, Яловец А.П.; правообладатель ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)». – 2025688934; заявл. 24.10.2025; зарегистр. 06.11.2025, реестр программ для ЭВМ.

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 20.02.2026. Формат 60×84 1/16. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 0,93. Тираж 100 экз. Заказ 17/33.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.
454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76.