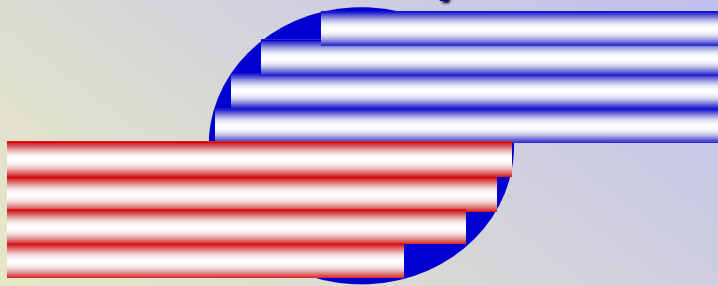


РФЯЦ



ВНИИТФ

В.Ф. Куропатенко

Уравнения состояния. Микро и макро подходы

***Межотраслевой семинар
"Применение ударных волн
в физике высоких давлений"***

***12 – 13 ноября 2013 г.
г. Саров, Россия***

1. Законы сохранения

Мир дискретен. Любой объём заполнен микрочастицами.

Сплошная среда - это математическая абстракция.

Но все её характеристики непрерывны в пространстве t, x, y, z .

Переход от микрочастиц к сплошной среде совершается в три этапа.

1 этап. Мгновенные законы сохранения.

При $t = \text{const}$ в произвольном объёме $\Delta\theta$ находится n частиц с характеристиками: $m_v, \bar{u}_v, \varepsilon_v$. Законы сохранения имеют вид

$$\Delta M = \sum_{v=1}^n m_v, \quad \Delta \bar{K} = \sum_{v=1}^n m_v \bar{u}_v, \quad \Delta Q = \sum_{v=1}^n m_v \varepsilon_v, \quad (1)$$

Средние по объёму $\Delta\theta$ величины определяются выражениями

$$\rho_c = \frac{\Delta M}{\Delta\theta} = \frac{1}{\Delta\theta} \sum_{v=1}^n m_v, \quad \bar{u}_c = \frac{\Delta \bar{K}}{\Delta M} = \sum_{v=1}^n \eta_v \bar{u}_v, \quad \varepsilon_c = \frac{\Delta Q}{\Delta M} = \sum_{v=1}^n \eta_v \varepsilon_v, \quad (2)$$

где $\eta_v = \frac{m_v}{\Delta M}$. Поскольку $\varepsilon_v = E_v + \frac{1}{2} \bar{u}_v^2$, $\varepsilon_c = E_c + \frac{1}{2} \bar{u}_c^2$, то из (2)

следует

$$E_c = \sum_{v=1}^n \eta_v \left(E_v + \frac{1}{2} (\bar{u}_v - \bar{u}_c)^2 \right), \quad (3)$$

где E_v - энергия связей атомов внутри v -й молекулы, энергия ядер атомов v -й молекулы и др.

2. Сплошная среда

Постулат сплошной среды:

СУЩЕСТВУЮТ ПРЕДЕЛЫ при $\Delta\theta \rightarrow 0, \Delta M \rightarrow 0$.

$$\left(\frac{\partial M}{\partial \theta}\right)_t = \lim_{\Delta\theta \rightarrow 0} \frac{\Delta M}{\Delta \theta}, \quad \left(\frac{\partial \bar{K}}{\partial M}\right)_t = \lim_{\Delta M \rightarrow 0} \frac{\Delta \bar{K}}{\Delta M}, \quad \left(\frac{\partial Q}{\partial M}\right)_t = \lim_{\Delta M \rightarrow 0} \frac{\Delta Q}{\Delta M}. \quad (1)$$

$$\rho = \left(\frac{\partial M}{\partial \theta}\right)_t, \quad \rho_c = \left(\frac{\Delta M}{\Delta \theta}\right), \quad \bar{U} = \left(\frac{\partial \bar{K}}{\partial M}\right)_t, \quad \bar{U}_c = \left(\frac{\Delta \bar{K}}{\Delta M}\right), \quad \varepsilon = \left(\frac{\partial Q}{\partial M}\right)_t, \quad \varepsilon_c = \left(\frac{\Delta Q}{\Delta M}\right). \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует

$$\rho = \lim_{\Delta\theta \rightarrow 0} \rho_c, \quad \bar{U} = \lim_{\Delta M \rightarrow 0} \bar{U}_c, \quad \varepsilon = \lim_{\Delta M \rightarrow 0} \varepsilon_c.$$

Аналогично для E

$$E = \lim_{\Delta M \rightarrow 0} E_c.$$

В результате 1 этапа определяются четыре характеристики состояния сплошной среды

$$\rho, \bar{U}, \varepsilon, E.$$

3. 2 этап. Определение давления

Пусть в выбранном объёме $\Delta\theta$ находится идеальный газ (частицы не взаимодействуют друг с другом, двигаются хаотически и взаимодействуют только со стенками объёма $\Delta\theta$). Пусть объём $\Delta\theta$ является кубом с гранью $\Delta\theta^{2/3}$ и ребром $\Delta\theta^{1/3}$. В процессе соударения ν -й молекулы со стенкой объёма $\Delta\theta$ её количество движения изменяется на величину

$$\Delta\bar{K}_\nu = m_\nu (\bar{U}_\nu^f - \bar{U}_\nu),$$

где \bar{U}_ν – скорость ν -й молекулы до удара, \bar{U}_ν^f – после удара. Согласно закону сохранения количества движения $\Delta\bar{K}_\nu$ равно импульсу силы, действующей не по нормали к соответствующей грани объёма $\Delta\theta$.

4. Определение P . Отражение и касание

Со стороны грани S_x на ν -ю молекулу действует сила $\bar{F}_{\nu x}$. Она имеет нормальную $F_{\nu xx}$ и касательные $F_{\nu xy}$, $F_{\nu xz}$ составляющие.

При взаимодействии с гранью S_x компоненты $U_{\nu x}$, $U_{\nu y}$, $U_{\nu z}$ скорости \bar{U}_ν удовлетворяют неравенствам:

– нормальная
$$(U_{\nu x}^f - U_x)(U_{\nu x} - U_x) < 0,$$

– касательные

$$(U_{\nu y}^f - U_y)(U_{\nu y} - U_y) > 0, \quad (U_{\nu z}^f - U_z)(U_{\nu z} - U_z) > 0.$$

Ограничимся простейшим законом взаимодействия:

при отражении
$$U_{\nu x}^f - U_x = -\gamma(U_{\nu x} - U_x), \quad (1)$$

при касании

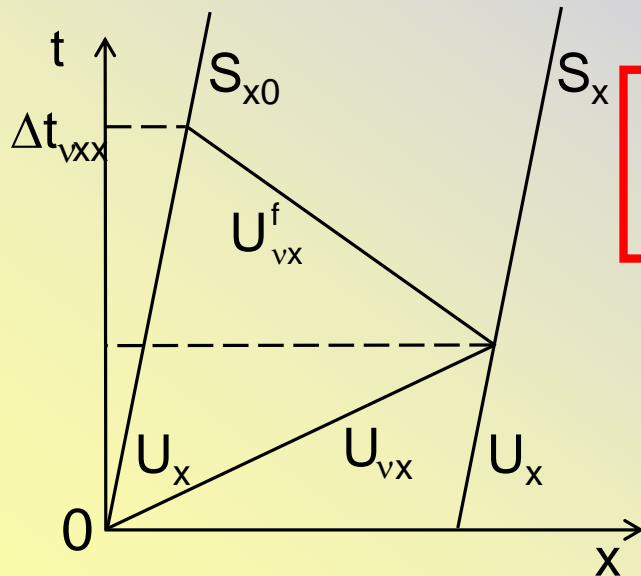
$$U_{\nu y}^f - U_y = \beta(U_{\nu y} - U_y), \quad U_{\nu z}^f - U_z = \beta(U_{\nu z} - U_z), \quad (2)$$

где коэффициенты аккомодации γ и β удовлетворяют неравенствам $0 < \gamma < 1$, $0 < \beta < 1$.

5. Определение Р. Нормальная компонента силы

Изменение нормальной компоненты количества движения ΔK_{vxx} равно импульсу нормальной силы F_{vxx}

$$\Delta K_{xx} = F_{vxx} \cdot \Delta t_{vxx}. \quad (1)$$



Постулат СС N2.

Силы \bar{F}_{vx} , \bar{F}_{vy} , \bar{F}_{vz} непрерывны по времени.

Условие непрерывного действия F_{vxx} имеет вид

$$\Delta t_{vxx} = \frac{(U_{vx}^f - U_{vx}) \Delta \theta^{1/3}}{(U_{vx} - U_x)(U_{vx}^f - U_x)}. \quad (2)$$

Подставив Δt_{vxx} и закон отражения $U_{vx}^f - U_x = -\gamma(U_{vx} - U_x)$ в (1), получим выражение для силы, действующей на v -ю молекулу по нормали со стороны грани S_x за время Δt_{vxx}

$$F_{vxx} = -\gamma m_v (U_{vx} - U_x)^2 \Delta \theta^{-1/3}.$$

6. Определение P . Касательные силы

Вдоль оси Oy изменение касательной компоненты количества движения равно импульсу касательной силы

$$m_v (U_{vy}^f - U_{vy}) = F_{vxy} \Delta t_{vxy}. \quad (1)$$

Согласно Постулату СС N2 $\Delta t_{vxy} = \Delta t_{vxz} = \Delta t_{vxx}$. Т.о. с учётом взаимодействия $U_{vy}^f - U_y = \beta (U_{vy} - U_y)$ для F_{vxy} получается выражение

$$F_{vxy} = -\frac{m_v}{\Delta \theta^{1/3}} \frac{\gamma(1-\beta)}{(1+\gamma)} (U_{vy} - U_y)(U_{vx} - U_x).$$

Аналогично получается выражение для F_{vxz} .

$$F_{vxz} = -\frac{m_v}{\Delta \theta^{1/3}} \frac{\gamma(1-\beta)}{(1+\gamma)} (U_{vz} - U_z)(U_{vx} - U_x).$$

7. Определение P. Тензор взаимодействия

Просуммировав по V выражения для $\bar{F}_{vxx}, \bar{F}_{vxy}, \bar{F}_{vzx}$ и разделив на площадь грани $S_{xx} = \Delta\theta^{2/3}$, запишем силу, действующую со стороны газа на единичную площадь грани

S_{xx} , в виде

$$\bar{F}_x = -\gamma\rho \sum_{v=1}^n \eta_v (\mathbf{U}_{vz} - \mathbf{U}_x) \left((\mathbf{U}_{vx} - \mathbf{U}_x) \bar{i} + \frac{1-\beta}{(1+\gamma)} \left((\mathbf{U}_{vy} - \mathbf{U}_y) \bar{j} + (\mathbf{U}_{vz} - \mathbf{U}_z) \bar{k} \right) \right).$$

Аналогично получаются

$$\bar{F}_y = -\gamma\rho \sum_{v=1}^n \eta_v (\mathbf{U}_{vy} - \mathbf{U}_y) \left(\frac{1-\beta}{(1+\gamma)} (\mathbf{U}_{vx} - \mathbf{U}_x) \bar{i} + (\mathbf{U}_{vy} - \mathbf{U}_y) \bar{j} + \frac{1-\beta}{(1+\gamma)} (\mathbf{U}_{vz} - \mathbf{U}_z) \bar{k} \right),$$

$$\bar{F}_z = -\gamma\rho \sum_{v=1}^n \eta_v (\mathbf{U}_{vz} - \mathbf{U}_z) \left(\frac{1-\beta}{(1+\gamma)} (\mathbf{U}_{vx} - \mathbf{U}_x) \bar{i} + \frac{1-\beta}{(1+\gamma)} (\mathbf{U}_{vy} - \mathbf{U}_y) \bar{j} + (\mathbf{U}_{vz} - \mathbf{U}_z) \bar{k} \right).$$

Коэффициенты векторов $\bar{F}_x, \bar{F}_y, \bar{F}_z$ образуют тензор взаимодействия. Согласно правилам механики, давление равно сумме диагональных членов с обратным знаком, делённой на 3

$$P_c = \frac{\gamma\rho}{3} \sum_{v=1}^n \eta_v (\bar{U}_v - \bar{U})^2$$

8. Уравнение состояния

Для одноатомного идеального газа $E_v = 0$, а при упругом взаимодействии $\beta = 0$, $\gamma = 1$. В этом случае из выражений

$$E_c = \sum_{v=1}^n \eta_v \frac{1}{2} (\bar{U}_v - \bar{U}_c)^2, \quad (1)$$

$$P_c = \frac{1}{3} \rho_i \sum_{v=1}^n \eta_v \frac{1}{2} (\bar{U}_v - \bar{U}_c)^2 \quad (2)$$

следует УРС одноатомного идеального газа

$$P = \frac{2}{3} \rho E.$$

Если нет суммирования, то индекс "С" опускается в соответствии с постулатом СС N1.

9. 3 этап. Определение температуры

Температура определяется теоремой Больцмана

На каждую степень свободы поступательного и вращательного движения приходится энергия $\frac{1}{2}kT$, на степень свободы колебательного движения – энергия kT .

n одноатомных молекул имеют $3n$ степеней свободы поступательного движения. Т.о. удельная внутренняя энергия равна

$$E_c = \sum_{v=1}^n \eta_0 \frac{1}{2} (\bar{u}^v - \bar{u}_c)^2 = \frac{3}{2} AT,$$

где $A = \frac{nk}{\Delta M}$ – индивидуальная газовая постоянная. В случае одного моля $n = N$, $\Delta M = \mu$ и $A = \frac{R}{\mu}$. Перейдя к пределу, получим зависимость E от T

$$E = \frac{3}{2} AT. \tag{1}$$

Из (1) и УРС $P = \frac{2}{3} \rho E$ следует термическое УРС

$$P = A\rho T.$$

Величины $P, \rho, \varepsilon, E, T$ являются характеристиками состояния сплошной среды.

10. Механика сплошной среды (МСС)

Любая модель сплошной среды включает в себя:

- Закон сохранения массы $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \bar{u} = 0.$
- Закон сохранения количества движения

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \nabla (\rho \bar{u}) + \rho (\bar{u} \bar{\nabla}) \bar{u} + \bar{\nabla} P = \frac{\partial \bar{s}_k}{\partial x_k}.$$

- Закон сохранения энергии $\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla (P + \rho \varepsilon) \bar{u} = \nabla \bar{q} + \frac{\partial \bar{s}_k \bar{u}}{\partial x_k},$
- Уравнения состояния $P(\rho, E)$ или $P(\rho, E)$, $P(\rho, E)$.
- Определяющие уравнения (упругость, пластичность, вязкость, магнетизм, теплопроводность, турбулентность).

УРС неотъемлемая часть модели МСС.

11. Сильные разрывы

Законы сохранения на поверхности сильного разрыва в идеальной сплошной среде имеют вид:

$$\rho(D - U_n) = \rho_0(D - U_{n0}), \quad (1)$$

$$\rho(D - U)U_n + P = \rho_0(D - U_{n0})U_{n0} + P_0, \quad (2)$$

$$\rho(D - U_n)\varepsilon + \rho U_n = \rho_0(D - U_{n0})\varepsilon_0 + \rho_0 U_{n0}, \quad U_\tau = U_{\tau 0} \quad (3)$$

Сильный разрыв (ударная волна) распространяется со скоростью

$$D = \frac{dx}{dt}.$$

По экспериментально измеренным значениям D и U из (1)-(3) находятся

$$P = P_0 + \rho_0(D - U_0)(U - U_0), \quad \rho = \rho_0 \frac{D - U_0}{D - U},$$

$$E = E_0 + \frac{P_0(U - U_0)}{\rho_0(D - U_0)} + \frac{1}{2}(U - U_0)^2.$$

Эти данные нужны для построения УРС.

12. История УРС. Эволюция

Открытие законов сохранения дало импульс развитию УРС. Процесс создания УРС каждого агрегатного состояния состоял из 2-х этапов:

1. Создание модели взаимодействия микрочастиц.
2. Переход от микромодели на макроуровень и получение зависимостей между термодинамическими величинами P , ρ , E , T , S , C_v и др. Эволюция УРС продолжалась до середины XX века.

1834 г. УРС идеального газа.

Клапейрон

1873 г. УРС реального газа.

Ван-дер-Ваальс

1890 г. УРС Конденсированной среды.

Грюнайзен

1901 г. Вириальное УРС.

Камерлинг-Оннес

1907 г. Теория теплоёмкости твёрдого тела.

Эйнштейн

1912 г. Теория теплоёмкости твёрдого тела.

Дебай

1920 г. Фазовые переходы.

Брэгг

1924 г. Потенциал взаимодействия атомов.

Леннард-Джонс

1926 г. Уравнение Шредингера.

Шредингер

1928 г. Модель многоэлектронного атома.

Томас, Ферми

1930 г. Модель самосогласованного поля.

Хартри, Фок

1934 г. Модель атома в ячейке.

Вигнер, Зейтц

1937 г. Модель присоединённых плоских волн (ППВ).

Слэйтер

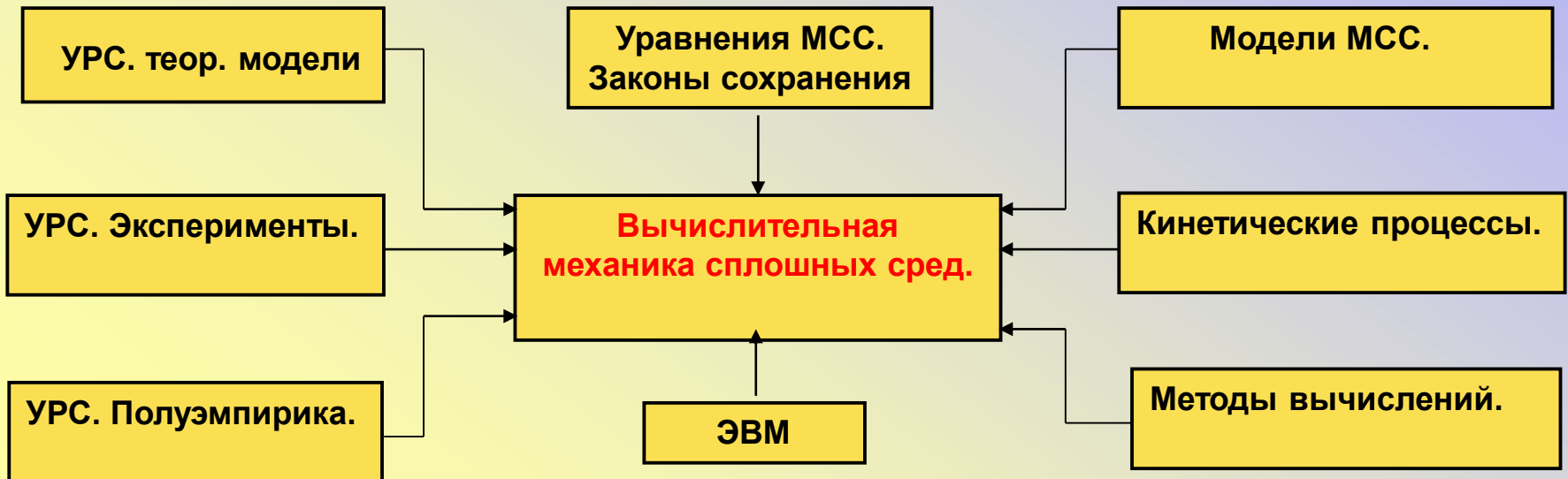
1947 г. Метод рассеянных волн (ККР).

Коринга, Кон, Ростокер

13. ЭВМ и революция в МСС

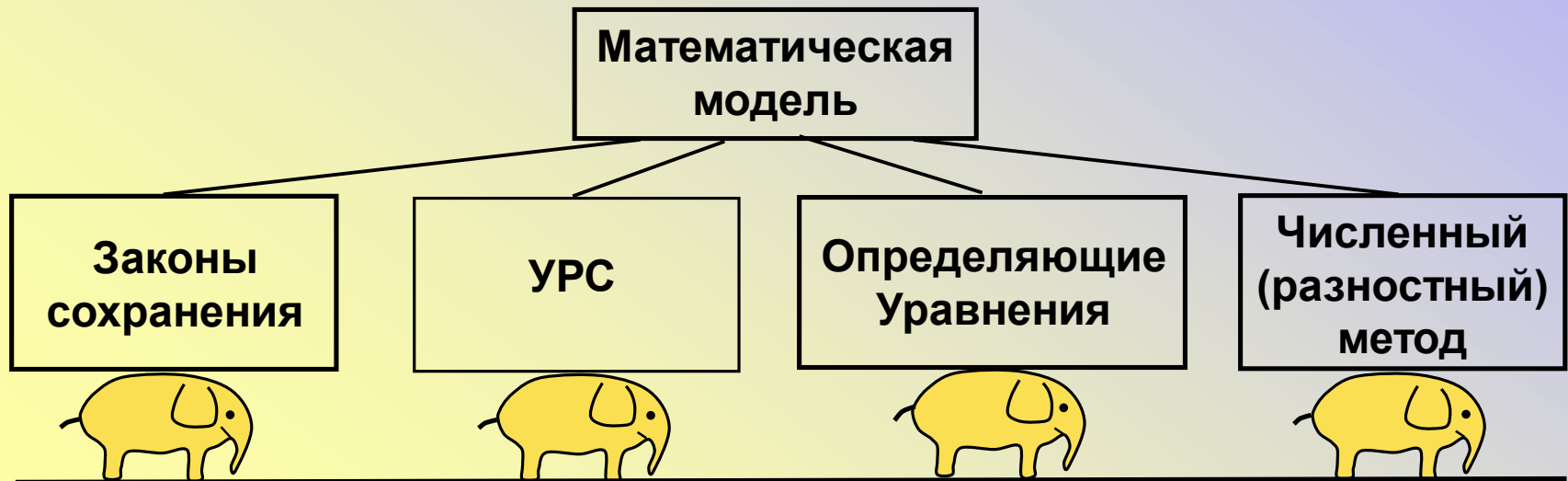
Появление ЭВМ в середине XX столетия – это начало новой эры в механике. Для разработки **ядерного оружия и освоения космоса** срочно потребовались модели нового поколения, в которых учитывались бы реальные свойства вещества. Стала интенсивно формироваться

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МЕХАНИКА СПЛОШНЫХ СРЕД



14. Принципиальное отличие от МСС

- В Вычислительной МСС ищутся и находятся решения **не дифференциальных, а разностных законов сохранения.** Переход к разностным уравнениям порождает большой перечень обязательных исследований их свойств.
- Вычислительная МСС состоит **ФАКТИЧЕСКИ** из двух блоков: разностных методов и моделей МСС.
- Основа вычислительной МСС – математическая модель – имеет такую структуру.



15. Рывок в развитии моделей МСС

Появление ЭВМ и вычислительной механики создало потребность в новых более сложных моделях среды, в новых УРС и определяющих уравнениях, в новых экспериментальных данных.

- Стала бурно развиваться физическая составляющая МСС:**
- Теоретические модели свойств веществ (Томаса-Ферми, Саха, Хартри-Фока и др.)**
 - Полуэмпирические УРС, пригодные для расчётов конструкций.**
 - Кинетические модели фазовых переходов, разрушения, турбулентности.**

- Новые задачи инициировали новые эксперименты:**
- Ударноволновые и детонационные эксперименты для получения информации о свойствах веществ и процессов.**
 - Эксперименты по изучению перемешивания и турбулентности, разрушения и фазовых переходов.**

16. Уравнения состояния (УРС)

Вещество находится в термодинамически равновесном состоянии, если его термодинамические характеристики не меняются со временем.

Из множества термодинамических характеристик две являются независимыми.

Уравнение, выражающее любую термодинамическую величину через независимые, называется уравнением состояния.

УРС связывает характеристики сплошной среды.

Любая из термодинамических зависимостей должна удовлетворять:

1. Условиям термодинамической совместности

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_S = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_P, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_T = -\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V = -\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S, \quad \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P.$$

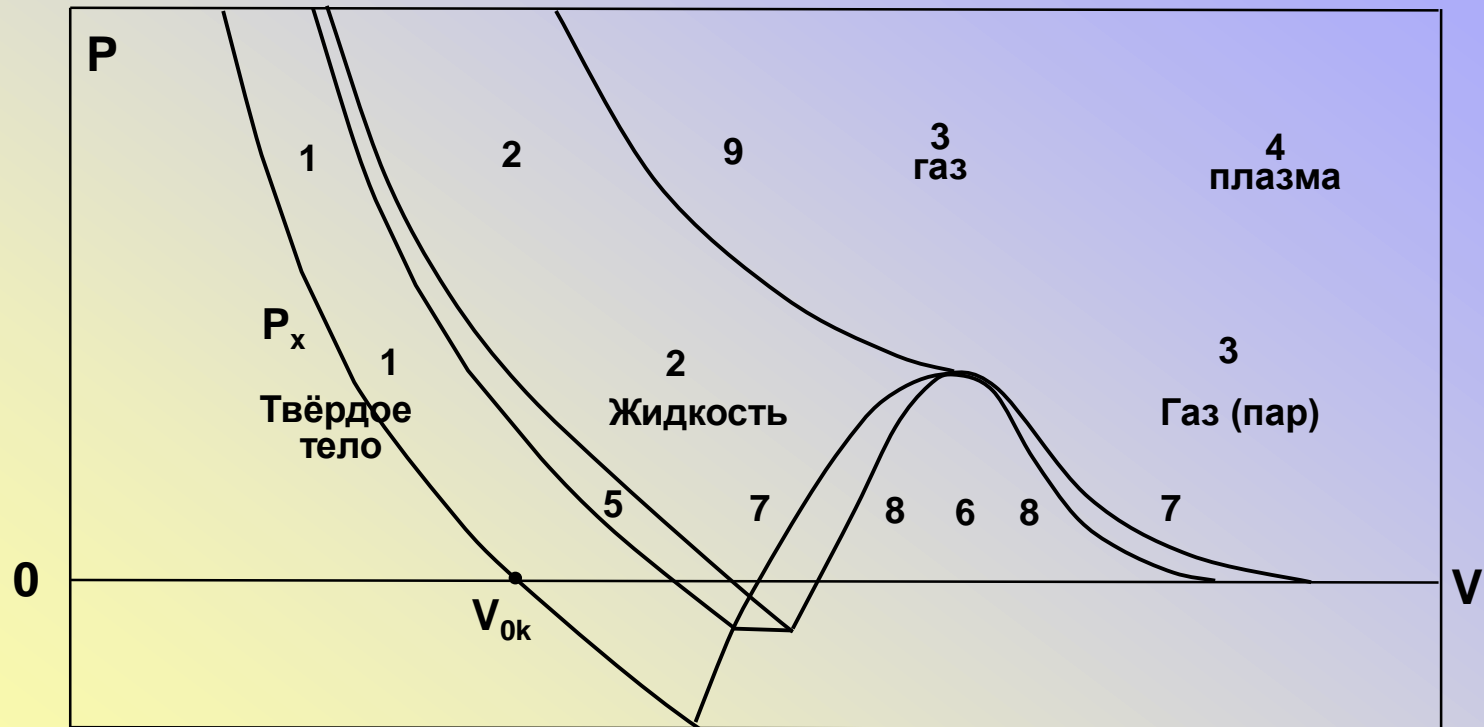
2. Условиям устойчивого термодинамического равновесия

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S < 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T < 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V > 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_S > 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V > 0, \quad P\left(\frac{\partial P}{\partial E}\right)_S > 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial E}\right)_V > 0,$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_T < 0, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P > 0, \quad \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V > 0, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S < 0, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P > 0, \quad \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V > 0, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V > 0, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_P > 0, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T > 0.$$

17. Агрегатные состояния

А.С. Схематически изображены на рис.



1. Твёрдое тело.
2. Жидкость.
3. Газ.
4. Плазма.
5. Плавление (ТТ+Ж).
6. Кипение (Ж+Г).
7. Бинодаль.
8. Спинодаль.
9. Критическая изотерма.

18. Организация работ по УРС

Для обеспечения точности математического моделирования процессов в ядерных устройствах в 1957 г. был создан семинар по свойствам веществ.

Участники: ИПМ АН СССР, ВНИИТФ и ВНИИЭФ.

Результатом работы семинара стало оснащение достаточно точными УРС программных комплексов для моделирования динамических процессов в сплошных средах.

В 1971 г. Н.Н. Яненко организовал Всесоюзную школу по моделям механики сплошных сред. От этой школы в 1978 г. отделилось Всесоюзное совещание по УРС в Чегете. Под руководством Фортова В.Е. оно в виде конференции успешно проводится до сих пор.

В последние годы проблемы совершенствования УРС обсуждаются на Забабахинских чтениях, Харитоновских чтениях, Лаврентьевских чтениях, на Съездах по механике и др.

19. МСС к началу XXI века

Достигнутый за полвека новой эры уровень моделей МСС и экспериментальных методов изучения свойств веществ отражен в литературе.

Обзоры

1. Л.В. Альтшулер. Применение ударных волн в физике высоких давлений //УФН. 1965, т. 85, вып. 2.
2. В.Б. Минцев, В.Е. Фортов. Взрывные ударные трубы //ТВТ. 1982, т. 80, № 4.
3. А.В. Бушман, В.Е. Фортов. Модели уравнения состояния вещества //УФН. 1983, т. 140, вып. 2.
4. Л.В. Альтшулер, Р.Ф. Трунин, К.К. Крупников, Н.В. Панов. Взрывные лабораторные устройства для исследования сжатия веществ в ударных волнах //УФН. 1996, т. 166, №5.

Монографии

1. Цянь Сюэ-сень. Физическая механика. М.: Мир. 1965 г.
2. Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука. 1966 г.
3. Л.И.Седов, Механика сплошной среды, т.1, т.2, Наука, 1970 г.
4. С.Г. Андреев, А.В. Бабкин, Ф.А. Баум и др. Физика взрыва. т.1 и т. 2. Под редакцией Л.П. Орленко. М.: Физматлит. 2004 г.

20. Ударноволновые эксперименты

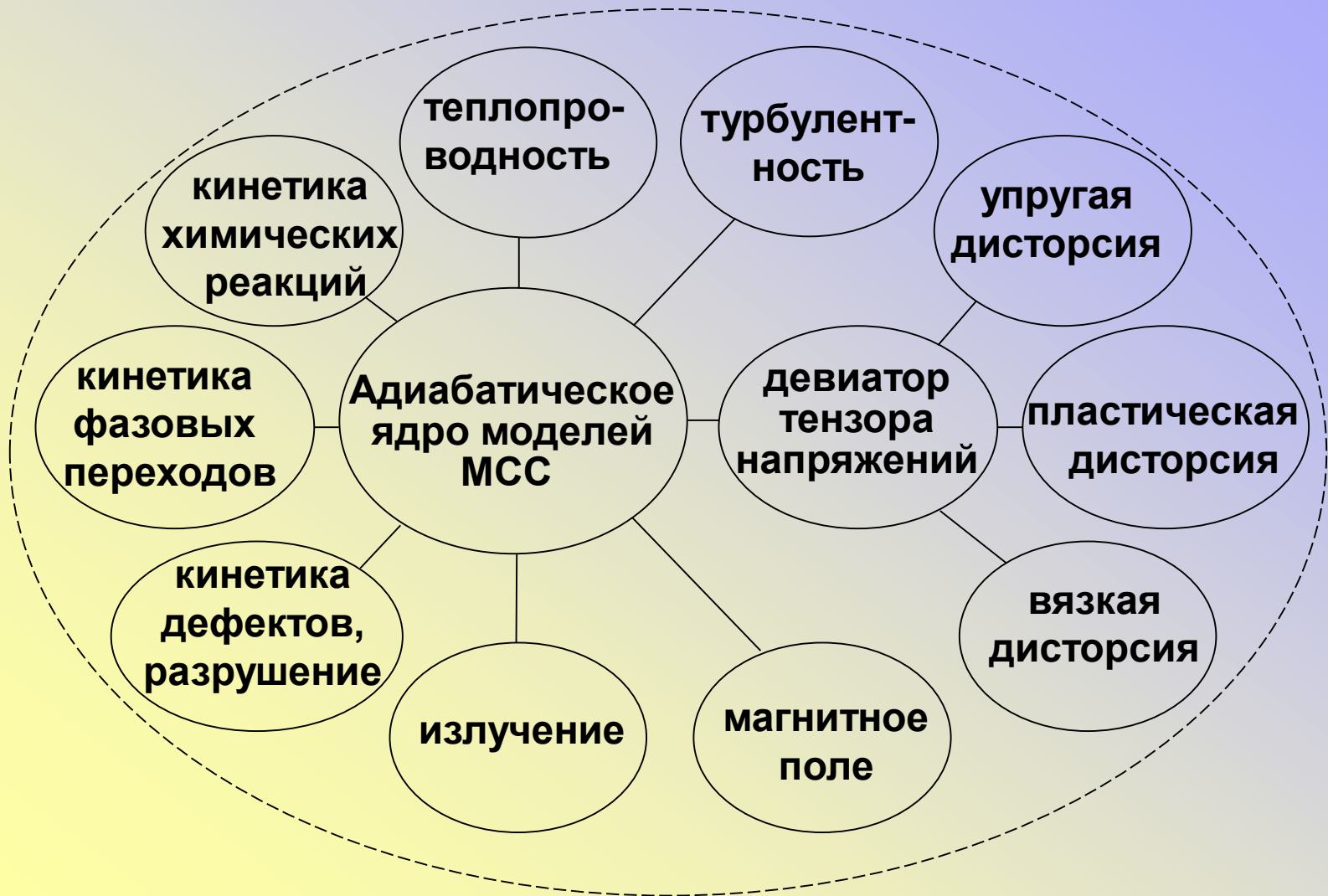
К началу XXI века были экспериментально измерены зависимости между скоростью ударной волны и скоростью вещества за фронтом для большинства элементов и огромного количества соединений, сплавов и смесей. По ним с помощью законов сохранения строятся ударные адиабаты.

Данные, полученные в ударноволновых экспериментах в период 1949-2006 гг., изложены в справочнике:

Р.Ф. Трунин, Л.Ф. Гударенко, М.В. Жерноклетов, Г.В. Симаков. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. – Саров.:РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2006 г.

21. Структура моделей МСС

Адиабатическое ядро \equiv уравнения Эйлера-Гельмгольца + УРС.



22. Энергия и давление

В основе современных моделей сплошной среды лежит принцип аддитивности внутренней энергии

$$E = E_x(V) + E_T(V, T) + E_d,$$

где

$$E_x = E_p(V) + E_{0a}(V) + E_{0e}(V),$$

$$E_T = E_{Ta}(v, T) + E_{Te}(v, T) + E_{Tf}(v, T).$$

Каждый вид энергии определяет компоненту шарового тензора напряжений - давления

$$P_x = -\frac{dE_x}{dv}, \quad P_p = -\frac{dE_p}{dv}, \quad P_{0a} = -\frac{dE_{0a}}{dv}, \quad P_{0e} = -\frac{dE_{0e}}{dv},$$

$$P_T = -\left(\frac{\partial E_T}{\partial v}\right)_s, \quad P_{Ta} = -\left(\frac{\partial E_{Ta}}{\partial v}\right)_s, \quad P_{Te} = -\left(\frac{\partial E_{Te}}{\partial v}\right)_s, \quad P_{Tf} = -\left(\frac{\partial E_{Tf}}{\partial v}\right)_s,$$

Энергия девиаторов определяется уравнением

$$\frac{dE_d}{dt} = \bar{S}_k \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_k}.$$

23. Триумф Вычислительной МСС

Сегодня быстродействие ЭВМ приближается к экзафлопному. Мат. моделирование применяется во всех естественных науках, в большинстве отраслей промышленности, в экономике, биологии, медицине и других областях.

На ЭВМ рассчитываются:

- Новые конструкции самолетов, надводных и подводных кораблей, автомобилей, ракет и других образцов техники,
- Химические реакции в технологических процессах,
- Взаимодействие тел при соударениях,
- Горение топлива в камерах двигателей,
- Процессы в тепловых, атомных и других электростанциях ,
- Движение крови в кровеносных сосудах.

Трудно назвать области человеческой деятельности, где не применяются ЭВМ и Вычислительная механика сплошной среды.

Во всех применениях Вычислительной МСС нужны УРС.

24. Обратная сторона триумфа ВМСС

Любая модель является приближенной. Об этом чаще всего забывают при интерпретации результатов расчетов. Выдавая поток цифр, ЭВМ отрывает их от модели, как бы экранирует модель от пользователя и избавляет его от необходимости понимания её достоинств и недостатков.

Доступность ЭВМ сделала мат. моделирование массовым занятием. В ЭВМ легко ввести **любую "новую" модель**. Подобрал значения эмпирических параметров, можно даже описать несколько экспериментов. Ну и что? Движением вперёд является не только создание новой модели но и обоснование её преимуществ. Иначе это топтание на месте – деградация. Такие результаты взаимодействия ЭВМ и пользователя вызывали и продолжают вызывать тревогу.

1976г. Л.И.Седов : "Теория моделирования деформируемых сред у нас и за границей заполнена мутными потоками дилетантской путаницы, которые сбивают с толку многих специалистов и учащихся"(ПМТФ, т. 40).

1983г. В.В.Новожилов: "Продолжают появляться без связи с потребностями практики всевозможные "мыслимые" модели сплошной среды, для упрощённых уравнений решаются краевые задачи, доказываются теоремы существования и единственности. Торжествует "механикоподобная математика". (Препринт №125 ЛГУ).

Ситуация сегодня не улучшилась!

25. Что нужно от экспериментов

Экспериментальные работы по изучению поведения материалов в условиях динамических воздействий продолжаются.

Экспериментаторы стараются сами обработать первичную информацию чаще всего применяя грубые и устаревшие модели. Для калибровки новых моделей

**НУЖНА ПЕРВИЧНАЯ ИНФОРМАЦИЯ
И ПОДРОБНОЕ ОПИСАНИЕ ПОСТАНОВКИ ОПЫТОВ.**

Очень мало экспериментальной информации о зависимости $D(U)$ в области малых P , где влияет девиатор напряжений.

Содержащаяся в справочниках информация о тепловом объёмном расширении при $P=10^{-4}$ ГПа применима лишь в инженерных расчётах. Для калибровки современных моделей нужны более точные данные.

В статьях об измерении параметров ударных волн в смесях для обработки первичных данных применяют "принцип аддитивности". В современных моделях МКС этот "принцип" не выполняется.

Практически нет данных об измерении скорости звука в компонентах и скорости звука в смеси при разных концентрациях компонентов.

26. "Потоки дилетантской путаницы". От чего пора отказаться

- 1. При обработке многих ударноволновых экспериментов волна разрежения заменяется зеркальной ударной адиабатой и используется гипотеза удвоения скорости после выхода ударной волны на тыльную поверхность образца. Всё это вчерашний день.**
- 2. Применение моделей, в которых одновременно используются дифференциальные и разностные уравнения, недопустимо.**
- 3. В математических моделях должны строго выполняться законы сохранения, в том числе при переходе с лагранжевой сетки на эйлерову.**
- 4. Математические модели должны быть инвариантными к преобразованию Галилея.**

27. Проблемы УРС

Для каждого из агрегатных состояний и каждой фазы вещества строятся локальные УРС, опирающиеся на гипотезы о характере взаимодействия микрочастиц и химических связей. Для определения значений параметров УРС используются экспериментальные данные и результаты применения теоретических моделей.

Но! Между областями применимости локальных УРС остаются белые пятна, где теор. моделей нет. Эти "ничейные территории" заполняются полуэмпирическими УРС. В их основе требования гладкости сшивки с окрестными поверхностями (математика). Они выполняются не строго.

Создатель УРС должен хорошо знать механику, физику, химию и математику.

Проблема:

Российские ВУЗы таких специалистов не готовят.

28. Пожелания, надежды и уверенность

Многие уравнения состояния и определяющие уравнения содержат эмпирические параметры, которые калибруются с помощью экспериментов.

К 2013 г. резко возросли возможности математического моделирования.

Созрели условия для создания моделей нового поколения с минимальным количеством эмпирических параметров.

Создание и применение таких моделей позволит не воспроизводить, а прогнозировать результаты любого физического процесса.

Только так можно ответить на вызов, который нам бросила вычислительная техника.

***Благодарю
за
внимание***

