

МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНОГО СЖАТИЯ И ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ ПЯТИ МЕТАЛЛОВ¹

В.Ф. Куропатенко², С.Ю. Филатов³

Предложен способ построения уравнений состояния в области небольших давлений. Основные параметры уравнения состояния подобраны для пяти металлов при помощи оригинальной версии симплекс метода. Метод использует линейные зависимости скорости ударной волны от скорости вещества и данные по тепловому расширению при постоянном давлении. В качестве целевой функции выбрана сумма квадратичных разностей между расчетными и экспериментальными величинами. Получено удовлетворительное совпадение с экспериментом.

Ключевые слова: уравнение состояния вещества; симплекс-метод; тепловое расширение; ударное сжатие.

Введение

В настоящее время в литературе описано большое количество уравнений состояния веществ (УРС) от очень простых до очень сложных [1–3]. При изучении поведения сплошных сред, которые подвергаются воздействию динамических нагрузок, применяется математическое моделирование, выполняющееся на электронных вычислительных машинах (ЭВМ). Число компонентов в сложных моделях многокомпонентных сред с химическими реакциями и фазовыми переходами может достигать нескольких десятков, а то и сотен. При расчете смеси в таких моделях затраты машинного времени могут растягиваться на значительное время даже с использованием современных ЭВМ. Предлагаемый малопараметрический УРС значительно сократит время расчета на ЭВМ сложных физических процессов.

Уравнения на поверхности сильного разрыва

В случае идеальной среды (девиатор тензора напряжений равен нулю и отсутствует теплопроводность) законы сохранения массы, импульса и энергии на поверхности сильного разрыва (ударной волны) имеют вид

$$\rho \cdot (D - U) = \rho_0 \cdot (D - U_0), \quad (1)$$

$$\rho \cdot (D - U)U - P = \rho_0 \cdot (D - U_0)U_0 - P_0, \quad (2)$$

$$P_0 = 0. \quad (3)$$

В уравнениях (1)–(3) величины без индекса характеризуют состояние за разрывом, D – скорость ударной волны. Величины с индексом, такие как ρ_0 – плотность, U_0 – массовая скорость, P_0 – давление, E_0 – удельная внутренняя энергия, описывают состояние вещества перед разрывом. Рассмотрим ударную волну в покоящемся веществе. Согласно [1] уравнение состояния рассматривалось в предположении, что величины P_0 и E_0 пренебрежимо малы по сравнению с P и E . Уравнения (1)–(3) принимают вид при $P_0 = 0$, $E_0 = 0$ и $U_0 = 0$:

$$\rho \cdot (D - U) - \rho_0 D = 0, \quad \rho_0 D U = P, \quad (4)$$

$$E = \frac{1}{2} D U \cdot \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right). \quad (5)$$

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №13-01-00072.

² Куропатенко Валентин Федорович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск.

E-mail: v.f.kuropatenko@rambler.ru

³ Филатов Сергей Юрьевич – научный сотрудник, Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск.

E-mail: phil@chel.ru

Система, состоящая из трех уравнений, (4), (5) содержит пять величин P , ρ , E , U , D . Если любые две из них получены экспериментальным путем, то остальные величины можно найти из выражений (4) и (5). Точка на ударной адиабате определяется полностью. Зависимость между экспериментально измеренными D и U известна уже более пятидесяти лет и описывается линейным соотношением

$$D = C_0 + b \cdot U. \quad (6)$$

На основе большого количества обработанных экспериментальных данных в справочнике [2] содержится информация по $D(U)$ соотношениям.

Давление P определяется калорическим уравнением состояния (УРС) вида $P = P(\rho, E)$ в том случае, если ρ и E – независимые термодинамические переменные. Сложные и трудоемкие современные УРС рассмотрены в [3], [4], однако, для экспресс-расчетов достаточно использовать простые УРС.

В [1] рассмотрено уравнение состояния вида

$$P = P_X(\rho) + P_T(\rho, S), \quad E = E_X(\rho) + E_T(\rho, S), \quad (7)$$

где

$$P_X = \frac{\rho_0 C_0^2}{n} (x^{-n} - 1), \quad P_T = \rho_0 C_0^2 \cdot f(S) \cdot x^{-\gamma}, \quad (8)$$

$$E_X = \frac{C_0^2}{n-1} \left(\frac{x^{1-n}}{n} + \frac{x(n-1)}{n} - 1 \right), \quad E_T = \frac{C_0^2 \cdot f(S)}{\gamma-1} x^{1-\gamma}. \quad (9)$$

C_0 – скорость звука перед ударной волной при $P = P_0$, $\rho = \rho_0$, S – энтропия, $n = \text{const}$, $\gamma = \text{const}$, $x = \rho_0 / \rho$.

Зависимости $P_X(E_X, x)$ и $P_T(E_T, x)$ следуют из (8) и (9)

$$P_X = \frac{(n-1)\rho_0 E_X}{x} + \rho_0 C_0^2 \cdot \left(\frac{1-x}{x^{n_0+1}} \right), \quad P_T = \frac{(\gamma-1)\rho_0 E_T}{x}, \quad (10)$$

УРС получим путем подстановки (10) в (7), которое принимает следующий вид

$$P = (\gamma-1)\rho_0 E x^{-1} + \phi(x), \quad (11)$$

где

$$\phi(x) = \frac{n-\gamma}{(n-1)n} x^{-n} + \frac{\gamma-1}{(n-1)x} - \frac{\gamma}{n}.$$

Согласно [1] уравнение (11) называется «уравнением с согласованными γ и n », если $\gamma = n$. Таким образом, уравнение (11) примет вид

$$P = (n-1)\rho_0 E \cdot x^{-1} + \rho_0 C_0^2 (x^{-1} - 1), \quad (12)$$

где ρ_0 , C_0 и n – постоянные величины.

Далее рассмотрим, при каких условиях уравнения (4), (5), (12) согласуются с линейной зависимостью $D(U)$. Зависимость $D(U)$ получим, путем исключения P , E и x в выражениях (4), (5) и (12).

$$D = \frac{n+1}{4} U + \sqrt{C_0^2 + \left(\frac{n+1}{4} U \right)^2}. \quad (13)$$

Сравнивая выражение (13) с выражением (6), можно увидеть, что эти зависимости различаются. Наименьшие отличия находятся в области $\frac{n+1}{4} U \ll C_0$.

Так как предположение о постоянстве n в УРС (12) приводит к нелинейной зависимости $D(U)$ в выражении (13), которая, в свою очередь, не согласуется с линейной зависимостью $D(U)$ (6), сделаем наоборот. Линейную зависимость $D(U)$ (6) примем за основу, P и E выра-

зим через C_0 и b из выражений (4) – (6). Полученные выражения подставим в (11) и найдем уравнение в котором n вдоль ударной адиабаты не может быть постоянной величиной

$$n = 2b \cdot (2 - b \cdot (1 - x)) - 1, \quad (14)$$

Уравнение состояния

Поведение вещества вместо УРС (12) будем описывать уравнением, в котором справедливо предположение, что n не зависит от x

$$P = (n(x) - 1) \cdot \rho_{0K} x^{-1} E + \rho_{0K} C_{0K}^2 \cdot \phi(x). \quad (15)$$

В уравнении (15) ρ_{0K} , C_{0K} – плотность и скорость звука в точке $P = 0$, $T = 0$, $x = 1$.

В [5–7] использовалось УРС типа (15), где величина n зависит от x . В уравнении (14) величина n линейно зависит от x в том диапазоне D и U , в котором справедлива зависимость $D(U)$ (6). Из выражений (4), (5) и (15) следует зависимость $n(x)$ (14), именуемая далее экспериментальной.

Функция $n(x)$ должна иметь максимум в окрестности $x \approx 1$ согласно [2] и [3]. Таким образом, если $x = 0$ и $n = n_0$, то справедливо утверждение, что $n_m > n_0$. Будем использовать простую функцию вида

$$n(x) = n_0 + (n_m - n_0) \frac{ax^2}{ax^2 + (x^2 - x_m^2)^2}, \quad (16)$$

где $a = \frac{16x_m^2}{4 - (n_m - n_0)^2}$.

Зная, что при $x = 0$ и $x = \infty$ $n(x) = n_0$, а также при $x = x_m$ $n(x) = n_m$, из (16) найдем производную $n(x)$ в виде

$$\frac{dn}{dx} = \frac{(n_m - n_0) \cdot 2ax^2 (x_m^2 - x^2)}{\left(ax^2 + (x^2 - x_m^2)^2\right)^2}. \quad (17)$$

Производная $n(x)$ равна нулю при $x = 0$, $x = \infty$ и $x = x_m$. То есть, с большой долей достоверности вещество можно считать газом с $\gamma = n_0$ при бесконечно большом сжатии $x \approx 0$ и бесконечно большом разрежении. Значение n_0 , как и значения n_m , x_m , подберем из условия наилучшего описания экспериментальных данных, т.к. область применимости малопараметрического УРС ограничена конечным сжатием.

Функцию $\phi(x)$ из (15) возьмем в виде, максимально близком к выражению (12)

$$\phi(x) = \frac{1 - x}{x^{n_0 + 1}}. \quad (18)$$

Разделим давление и энергию на холодные и тепловые составляющие для определения температуры и теплоемкости:

$$P = P_X(x) + P_T(x, T), \quad E = E_X(x) + E_T(x, T). \quad (19)$$

В соответствии с [7] зависимость $E_T(x, T)$ возьмем в виде

$$E_T = \frac{AT^2}{\theta(x) + T}, \quad (20)$$

где A – индивидуальная характеристика вещества, для простых веществ близкая к $3R/\mu$; R – универсальная газовая постоянная; μ – молекулярная масса. Дифференцируя выражение (20), получим теплоемкость при постоянном x

$$C_V = \frac{AT \cdot (2\theta(x) + T)}{(\theta(x) + T)^2}. \quad (21)$$

В соответствии с [7] выражение для теплового давления будет иметь вид

$$P_T = -\frac{A}{\theta(x)} \cdot \frac{d\theta(x)}{dx} \cdot \frac{T^2}{\theta(x) + T}. \quad (22)$$

Зная, что справедливо уравнение

$$P_T = (n(x) - 1) \frac{\rho_{0K}}{x} E_T, \quad (23)$$

получим характеристическую функцию $\theta(x)$, которая связана с $n(x)$ уравнением

$$\frac{d \ln \theta(x)}{dx} = -\frac{n(x) - 1}{x}. \quad (24)$$

Зависимость $\theta(x)$ следует из выражений (24) и (16)

$$\theta(x) = \theta_0 \cdot x^{1-n_0} \cdot \left(\frac{x^2 + B \cdot x_m^2}{x^2 + \frac{1}{B} \cdot x_m^2} \right), \quad (25)$$

где $B = \frac{2 + (n_m - n_0)}{2 - (n_m - n_0)}$.

Дополнительно, сделаем такое условие, чтобы изобара $P = 10^{-4}$ ГПа проходила через точку, характеризующую нормальное состояние ($P = 10^{-4}$ ГПа, $T = 293$ °К, $\rho = \rho_0$, $C_P = C_{P0}$), а также через точку плавления при $P = 10^{-4}$ ГПа ($T = T_{nl}$, $C_P = C_{Pnl}$, $\rho = \rho_{nl}$). При описании зависимости $C_P(T)$ при $P = \text{const}$ следует выразить C_P через T и x . С этой целью воспользуемся уравнением из [8]

$$C_P = C_V - \frac{T \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_X^2}{\rho_{0K} \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)_T}. \quad (26)$$

Зная, что $\left(\frac{\partial P_X}{\partial T} \right)_X = 0$ продифференцируем выражение (23). Производная $\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_X$ запишется в виде

$$\left(\frac{\partial P_T}{\partial T} \right)_X = \frac{(n(x) - 1) \cdot \rho_{0K}}{x} \cdot C_V. \quad (27)$$

Так как выражение (19) справедливо, то производная $\left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)_T$ будет иметь вид

$$\left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)_T = \frac{dP_X}{dx} + \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)_T. \quad (28)$$

Уравнение состояния вещества определяется совокупностью уравнений (15)–(17) и (25) и содержит 7 параметров: ρ_{0K} , C_{0K} , A , n_0 , n_m , x_m и θ_0 . Численные значения этих параметров определяются таким образом, чтобы наилучшим образом описать поведение ударной адиабаты состояния вещества в точке, характеризующей нормальное состояние $P_0 = 10^{-4}$ ГПа, $T_0 = 293$ °К, $\rho_0 = \rho(P_0, T_0)$, $C_{P0} = C_P(\rho_0, T_0)$ и в точке плавления $P_{nl} = 10^{-4}$ ГПа, $T_1 = T_{nl}$, $\rho_1 = \rho_{nl}(T_{nl}, P_0)$, $C_{P1} = C_P(T_{nl}, P_0)$.

Результаты расчетов

Расчеты выполнены для нескольких простых веществ – металлов. При помощи оригинальной версии симплекс-метода выполнен подбор основных параметров уравнения состояния. В качестве целевой функции выбрана сумма квадратичных разностей между расчетными и экспериментальными значениями теплового расширения вещества и теплоемкости при постоянном давлении. Для рассмотренных материалов получено удовлетворительное совпадение с экспериментальными данными. На рис. 1 показано сравнение безразмерного давления для ударных адиабат рассчитываемых материалов. Величина безразмерного давления определяется по формуле (29):

$$\Pi = \frac{P}{\rho_0 C_0^2}. \quad (29)$$

В качестве сравниваемых величин давлений используются экспериментальные, взятые из [2], и теоретические, определяемые из выражения (15).

Зависимость теплоемкости от температуры приведена на рис. 2, экспериментальные значения теплоемкости взяты из справочника [9]. В таблицу сведены результаты расчетов подбора основных параметров УРС.

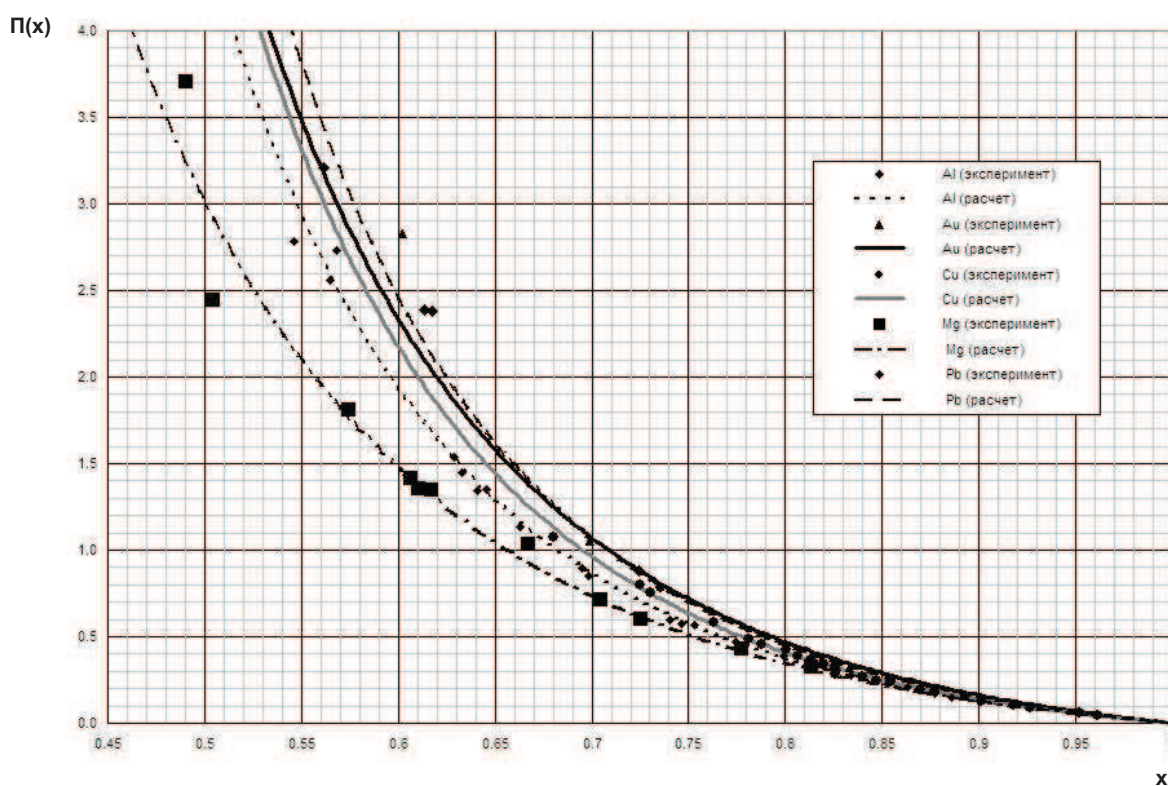


Рис. 1. Сравнение экспериментальных и теоретических зависимостей $\Pi(x)$ на ударной адиабате

Результаты подбора основных параметров уравнения состояния

Величины	Вещества				
	Al (алюминий)	Au (золото)	Mg (магний)	Pb (свинец)	Cu (медь)
n_0	1,62	1,515	1,291	1,719	1,49
n_m	1,933	2,564	1,944	2,027	2,997
x_m	1,908	2,485	2,613	1,66	2,484
ρ_{0K} , г/см ³	2,908	19,668	1,833	11,501	9,014
C_{0K} , км/с	5,642	3,402	4,724	2,102	3,904
$A \cdot 10^6$, кДж/г	920,39	140,65	1106,14	127,6	394,94
θ_0 , К	15,012	8,004	43,141	39,198	1,466

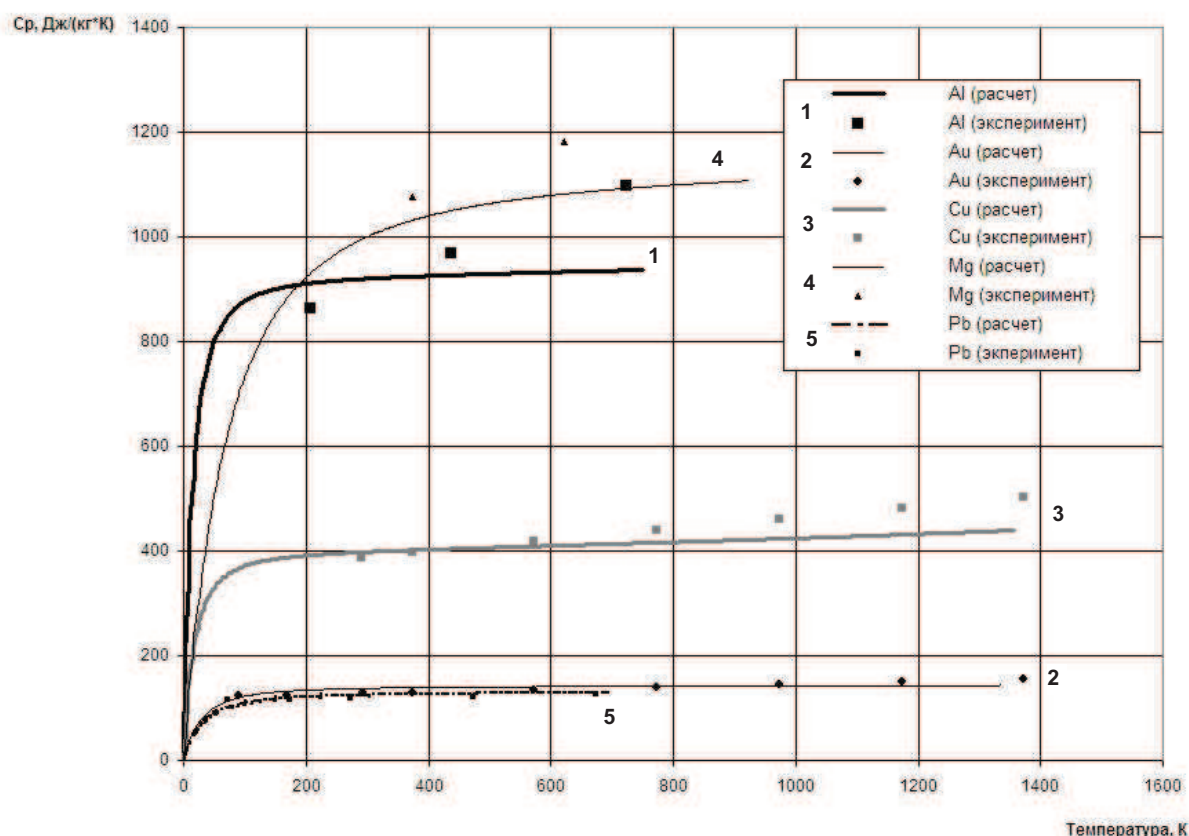


Рис. 2. Сравнение экспериментальных и теоретических зависимостей $C_p(T)$

Литература

1. Забабахин, Е.И. Некоторые вопросы газодинамики взрыва / Е.И. Забабахин. – Снежинск: РФЯЦ-ВНИИФ, 1977. – 203 с.
2. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению веществ / Р.Ф. Трунин, Л.Ф. Гударенко, М.В. Жерноклетов, Г.В. Симаков. – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001. – 439 с.
3. Жарков, В.И. Уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах / В.И. Жарков, В.А. Калинин. – М.: Наука, 1968. – 310 с.
4. Куропатенко, В.Ф. Уравнение состояния компонентов низкотемпературной плазмы / В.Ф. Куропатенко // Энциклопедия низкотемпературной плазмы: сб. науч. тр. – М.: Янус-К, 2008. – Серия Б, Том VII. – Ч. 2. – С. 436–450.
5. Куропатенко, В.Ф. Уравнение состояния продуктов детонации конденсированных ВВ / В.Ф. Куропатенко // Численные методы механики сплошных сред. – Новосибирск, ВЦ СО АН СССР, ИТПМ СО АН СССР, 1977. – Т. 8, №6. – С. 68–71.
6. Куропатенко, В.Ф. Уравнение состояния продуктов детонации плотных ВВ / В.Ф. Куропатенко // Физика горения и взрыва. – 1989. – № 6. – С. 112–117.
7. Куропатенко, В.Ф. Моделирование отклика веществ на динамическое воздействие / В.Ф. Куропатенко // Химическая физика. – 2002. – Т. 21, № 10. – С. 46–54.
8. Куропатенко, В.Ф. Модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко. – Челябинск: Челябинский государственный университет. – 2007. – 302 с.
9. Физико-химические свойства элементов. Справочник / под ред. Самсонова Г.В. – Киев: Наукова думка, 1965. – 808 с.

Поступила в редакцию 26 июня 2014 г.

MODELLING OF SHOCK COMPRESSION AND THERMAL EXPANSION OF FIVE METALS

V.F. Kuropatenko¹, S.Yu. Filatov²

The method of building equations of state in the area of low pressures is offered. The method is based on linear dependence of shock wave velocity on a substance velocity and thermal expansion data at constant pressure. Linear dependence of shock wave velocity on mass velocity leads to the dependence of Grüneisen parameters on the density. This data is used together with thermal expansion data at constant pressure. The parameters for the equation of state are computed for five metals with the help of the original version of Simplex method. A sum of quadratic differences between calculated and experimental values is selected as a target function. The theoretical values have agreed with the experimental one.

Keywords: equation of state; Simplex method; thermal expansion; shock compression.

References

1. Zababakhin E.I. *Nekotorye voprosy gazodinamiki vzryva* (Some issues of gas dynamics of explosion). Snezhinsk, RFYaTs-VNIIF, 1977. 203 p. (in Russ.).
2. Trunin R.F., Gudarenko L.F., Zhernokletov M.V., Simakov G.V. *Eksperimental'nye dannye po udarno-volnovomu szhatiyu i adiabaticheskomu rasshireniyu veshchestv* (Experimental data about shock wave compression and adiabatic expansion of substances). Sarov: RFYaTs-VNIIEF, 2001. 439 p. (in Russ.).
3. Zharkov V.I., Kalinin V.A. *Uravnenie sostoyaniya tverdykh tel pri vysokikh davleniyakh i temperaturakh* (Equation of state for solids at high pressure and temperatures). Moscow, Nauka, 1968. 310 p. (in Russ.).
4. Kuropatenko V.F. Uravnenie sostoyaniya komponentov nizkotemperaturnoy plazmy (Equation of state for components of low-temperature plasma). *Entsiklopediya nizkotemperaturnoy plazmy. Chast 2.* (Encyclopaedia of low-temperature plasma. Part 2). Moscow, Yanus-K Publ., 2008. Series of B. Vol. VII. pp. 436–450. (in Russ.).
5. Kuropatenko V.F. *Chislennyye metody mekhaniki sploshnykh sred.* Novosibirsk, VTs SO AN SSSR Publ., ITPM SO AN SSSR Publ., 1977. Vol. 8, no. 6. pp. 68–71. (in Russ.).
6. Kuropatenko V.F. *Fizika goreniya i vzryva.* 1989. no. 6. pp. 112–117. (in Russ.).
7. Kuropatenko V.F. *Khimicheskaya fizika.* 2002. Vol. 21, no. 10. pp. 46–54. (in Russ.).
8. Kuropatenko V.F. *Modeli mekhaniki sploshnykh sred* (Models of continuum mechanics). Chelyabinsk, Chelyabinskiy gosudarstvennyy universitet Publ., 2007. 302 p. (in Russ.).
9. Samsonov G.V. (ed.) *Fiziko-khimicheskie svoystva elementov. Spravochnik* (Physical and chemical properties of elements. Handbook). Kiev, Naukova dumka, 1965. 808 p. (in Russ.).

Received 26 June 2014

¹ Kuropatenko Valentin Fedorovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Senior Researcher, Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk.

E-mail: vfkuropatenko@rambler.ru

² Filatov Sergey Yurjevich is Resercher, Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk.

E-mail: phil@chel.ru