

В.Ф.КУРОПАТЕНКО, А.Т.САПОЖНИКОВ

РАСЧЕТ НЕУСТАНОВИВШИХСЯ ДВИЖЕНИЙ СЖИМАЕМЫХ СРЕД С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ.

В последние годы значительно вырос интерес к фазовым переходам вещества в условиях больших динамических нагрузок. Экспериментальному изучению этого явления посвящено много статей и даже книг [1], [2]. В то же время почти отсутствуют расчеты движения вещества с фазовыми переходами. Это объясняется с одной стороны трудностями, связанными с построением модели вещества в исследуемой области плотностей, давлений и температур, и с другой стороны появлением в решении ряда особенностей (расщепление ударных волн и слабых разрывов, скачки разрежения и др.), для удовлетворительного выявления и описания которых с помощью разностных методов сквозного счета необходимо брать очень много точек сетки.

Фазовый переход может быть описан с помощью двух существенно разных моделей: равновесной и неравновесной. В обеих моделях предполагается, что термическое и калорическое уравнения состояния каждой фазы в отдельности известны. Этого оказывается достаточно для построения уравнения состояния в области смеси фаз в равновесной модели. Оно получается с помощью условий равновесия (равенство давлений, температур и термодинамических потенциалов Гиббса двух фаз). В неравновесной модели вместо условий равновесия для построения уравнения состояния смеси нужно использовать уравнения кинетики. Они определяют скорость фазового перехода как функцию давления, температуры, плотности, разности потенциалов Гиббса и некоторых других величин таких, например, как характер нагружения (статическое сжатие или ударное).

В настоящее время экспериментальные данные для описания

фазовых переходов веществ в рамках равновесной модели известны более достоверно и в несравненно большем объеме, чем данные по кинетике фазовых переходов в условиях динамических нагрузок. Вопрос о том, какой модели следует отдать предпочтение, в каждом конкретном случае должен рассматриваться особо.

Расчету нестационарных движений вещества с фазовыми переходами посвящено несколько работ. В [3] рассматривается задача о столкновении двух железных пластин. Фазовый переход в железе предполагается неравновесным. Учитываются упруго-пластические свойства. В [4] рассчитывается движение вещества, испаренного под воздействием луча лазера. В [5] излагается разностная схема и уравнение состояния, учитывающее испарение. В [6] рассмотрена структура вязкого скачка в среде с фазовым переходом второго рода. Установлено, что в точке фазового перехода профиль давления испытывает излом. Численные результаты сравниваются с точным решением. Во всех перечисленных статьях расчет ведется с помощью однородных разностных методов, не выделяющих особенностей в решении.

В данной работе обсуждаются вопросы, связанные с расчетом движений вещества в равновесных фазовых переходах. Для расчетов применяется неоднородный разностный метод, выделяющий основные особенности в решении. Все расчеты проводились по программе РАНД (расчет адиабатических нестационарных движений). Ниже рассмотрим характерные особенности таких движений, метод расчета, уравнение состояния и результаты расчета одной из задач.

Законы сохранения массы, количества движения и энергии в дифференциальной форме в координатах Лагранжа имеют вид

$$\frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial u}{\partial m} - \frac{(\alpha-1)uv}{r} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial m} = 0, \quad \frac{\partial r}{\partial t} = u, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + p \frac{\partial v}{\partial t} = 0, \quad (3)$$

где v - удельный объем, p - давление, u - массовая скорость, t - время, E - удельная внутренняя энергия, m - массовая лагранжева координата $dm = \rho(dx - udt)$, $\rho = \frac{1}{v}$.
 /Уравнения (1) - (3) замыкается уравнением состояния вида

$$\rho = \rho(v, E). \quad (4)$$

Уравнения (3) и (4) определяют изэнтропу.

Ввиду сложности функции $\rho = \rho(v, E)$ изэнтропа строится численно. Для этого уравнение (3) преобразуется к виду

$$E = E_0 - \int_{v_0}^v \rho \, dv,$$

затем интеграл заменяется суммой

$$E = E_0 - \sum_{v=0}^Z \rho^*(v-v_0) \frac{1}{Z}, \quad (5)$$

где Z - количество слагаемых, определяемое всякий раз, исходя из условий точности расчета изэнтропы.

На сильных разрывах законы сохранения записываются в виде

$$\omega \Delta v + \Delta u = 0, \quad \omega \Delta u - \Delta \rho = 0, \quad (6)$$

$$\Delta E + 0.5(\rho_+ + \rho_-) \Delta v = 0, \quad (7)$$

где Δf - скачок величины f , ω - скорость распространения сильного разрыва в лагранжевых координатах, индексы "+" и "-" приписываются величинам по разные стороны скачка. Уравнение (7) вместе с (4) определяют адиабату Гюгонио.

Фазовые переходы вызывают изломы изэнтроп и адиабат Гюгонио на границах стабильности фаз (равновесную смесь фаз можно трактовать, как отдельную фазу). Мы будем предполагать, что в каждой отдельно взятой фазе выполняются условия термодинамической устойчивости и выпуклости.

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial v}\right)_s < 0, \quad \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial v^2}\right)_s > 0. \quad (8)$$

На рис.2 показаны типичные в случае фазового перехода первого рода изэнтропа и адиабата Гюгонио.

Система уравнений (1), (2) аппроксимируется разностными уравнениями

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} + \frac{\bar{p}_{i-0.5}^n - \bar{p}_{i+0.5}^n}{0.5(m_{i+0.5}^n + m_{i-0.5}^n)} = 0, \quad (9)$$

$$r_i^{n+1} = r_i^n + u_i^{n+1} \tau, \quad (10)$$

$$\rho_{i+0.5}^{\eta+1} [(\rho_{i+1}^{\eta+1})^\alpha - (\rho_i^{\eta+1})^\alpha] = \rho_{i+0.5}^\alpha [(\rho_{i+1}^\alpha)^\alpha - (\rho_i^\alpha)^\alpha]. \quad (II)$$

Решение разностных уравнений, когда изменение термодинамических величин происходит изэнтропически, назовем R -волной. Если же изменение термодинамических величин определяется адиабатой Гюгонио, то такое решение разностных уравнений назовем S -волной.

На R -волне $E^{\eta+1}$ и $\rho^{\eta+1}$ вычисляются с помощью (4) и (5), где

$$\begin{aligned} v_0 &= v^\alpha, & E_0 &= E^\alpha, & v &= 1/\rho^{\eta+1}, & E &= E^{\eta+1}, \\ \bar{\rho} &= \rho, & \rho^y &= \rho(v^y, E^y), \\ v^y &= v^{y-1} \frac{v^{\eta+1} v^\alpha}{2}, & E^y &= E^{y-1} \rho^{y-1} \frac{v^{\eta+1} v^\alpha}{2}. \end{aligned} \quad (I2)$$

На S -волне

$$E^{\eta+1} = E^\alpha 0.5 (\bar{\rho}^2 \bar{\rho}^{\eta+1}) (v^{\eta+1} v^\alpha). \quad (I3)$$

Величина $\bar{\rho}^{\eta+1}$ определяется из (6), (7) и (4), где

$$u = v^\alpha, \quad p = \rho^\alpha, \quad E = E^\alpha, \quad \Delta u = u_{i+1}^{\eta+1} - u_i^{\eta+1}.$$

Для повышения экономичности методики при малых величина $\bar{\rho}$ находится с помощью так называемого квазиакустического приближения

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \rho^\alpha + \omega |\Delta u|, \\ \omega &= \alpha^2 \rho^\alpha |\Delta u|, \quad \alpha = \sqrt{-\left(\frac{\partial \rho}{\partial v}\right)_S}. \end{aligned} \quad (I4)$$

Нами использовался следующий критерий отделения R волн от S волн.

Если $\frac{u_{i+1} - u_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} < 0$, то решение является S волной.

Если же $\frac{u_{i+1} - u_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \geq 0$, то разделение R и S волн производится так. Путем предварительного анализа устанавливается, в каких фазах вещества могут возникать скачки разрежения. Эти фазы отмечаются какой-либо меткой. Если в процессе счета оказывается, что вещество перешло в одну из фаз с меткой, то величины $\rho^{\eta+1}$ и $E^{\eta+1}$ в процессе разгрузки рассчитываются как на S волне. В противном случае - как на R волне.

Погрешность аппроксимации и условие устойчивости изложенного выше разностного метода (без фазовых переходов) описаны в [7]. В случае фазовых переходов эти свойства метода оценивались экспериментально путем сравнения численных расчетов

с точным решением для модельных уравнений состояния. Результаты таких сравнений можно считать вполне хорошими.

Наиболее важные ударные волны рассчитываются как скачки, перемещающиеся по регулярной сетке. В соответствии с принятой терминологией будем называть их "точными" ударными волнами. Для расчета "точных" фронтов используются уравнения (4), (6), (7) к которым добавляются еще два уравнения.

$$r^{n+1} = r^n + D^n \tau, \quad (15)$$

$$\Delta \rho^{n+1} = \Delta \rho^n - \frac{(\alpha_+^2)^2}{\omega^n} (\Delta u^{n+1} - \Delta u^n) - \tau A^n, \quad (16)$$

$$A = \frac{(\alpha-1)u_+ v_+ \alpha_+^2}{r} + \frac{\alpha_+^2 - \omega^2}{\omega} \left(\frac{\partial \rho}{\partial m} \right)_+ + \frac{d\rho}{dt} + \frac{\alpha_+^2}{\omega} \frac{du}{dt}.$$

Разностное уравнение (16) аппроксимирует с погрешностью $O(\tau)$ обыкновенное дифференциальное уравнение, справедливое вдоль фронта

$$\frac{d\Delta\rho}{dt} = -\frac{\alpha_+^2}{\omega} \frac{d\Delta u}{dt} - A.$$

Состояние перед фронтом ударной волны предполагается меняющимся. Производные $\frac{d\rho}{dt}$ и $\frac{du}{dt}$ находятся с помощью интерполяции после вычисления решения в некоторой области перед фронтом. Подробно метод расчета "точных" фронтов (без фазовых переходов) рассмотрен в [8].

Если после расчета параметров "точного" фронта окажется, что вещество за и перед фронтом принадлежит одной фазе, то такая ударная волна устойчива и на этом ее расчет заканчивается. Если же вещество за и перед фронтом оказывается в разных фазах, то необходимо проверить устойчивость фронта. Прежде всего в плоскости ρ, v между точками $A(\rho, v_+)$ и $B(\rho_-, v_-)$ рис. I строится численно адиабата Гюгонио. Затем находятся точки пересечения адиабаты Гюгонио с границами фаз. Вообще говоря, таких точек может быть несколько. В дальнейшем для простоты изложения ограничимся случаем, когда имеется только одна такая точка C .

Если эта точка C лежит ниже луча, проходящего через точки A и B , то ударная волна устойчива и на этом ее расчет заканчивается. Ударная волна оказывается на грани устойчивости, когда точка пересечения C лежит на луче

(луч AB на рис.1).

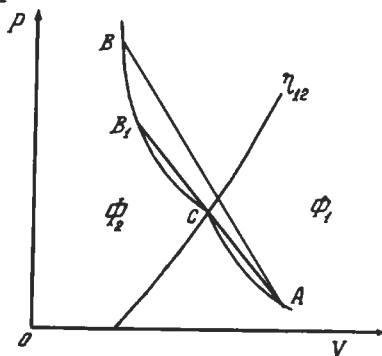


Рис.1.

Φ_1 - фаза 1, Φ_2 - фаза 2, n_{12} - граница фаз, A - точка перед фронтом ударной волны, B и B_1 - точки за фронтом.

В этом случае ударная волна расщепляется, т.е. заменяется двумя ударными волнами с параметрами.

$$1. \quad \rho_- = \rho_A, \quad u_- = u_A, \quad E_- = E_A, \quad u_- = u_A, \quad \rho_+ = \rho_C, \quad u_+ = u_C, \quad E_+ = E_C, \quad u_+ = u_C.$$

$$2. \quad \rho_- = \rho_C, \quad u_- = u_C, \quad E_- = E_C, \quad u_- = u_C, \quad \rho_+ = \rho_{B1}, \quad u_+ = u_{B1}, \quad E_+ = E_{B1}, \quad u_+ = u_{B1}.$$

В разностном счете может оказаться, что точка C лежит выше соответствующего луча. В этом случае параметры за фронтом ударной волны будут определены приближенно. Величина этой погрешности пропорциональна величине \angle - отклонению точки C от луча (доказательство опускаем ввиду его трю - мозкости). В свою очередь, \angle пропорционально шагу по времени τ . Поэтому указанные погрешности можно ограничить хотя бы выбором τ . Все сказанное о "точных" фронтах относится к ударным волнам сжатия. Скачки разрежения рассчитываются с помощью метода сквозного счета.

Рассмотрим конденсированное вещество, имеющее лишь две модификации, между которыми возможен полиморфный фазовый переход. Уравнение состояния обеих фаз возьмем в виде

$$\rho = \rho_x(\rho) + \rho_T, \quad E = E_x(\rho) + E_T, \quad (17)$$

$$p_x = \frac{\rho_0 c_0}{n} (\delta^n - 1), \quad \rho_T = \Gamma c_0 \rho T, \quad (17)$$

$$E_x = \frac{c_0^2}{n} \left[\frac{\delta^{n-1}}{n-1} + \frac{1}{\delta} \right] + E_0, \quad E_T = c_0 T,$$

где $\delta = \rho / \rho_0$, $c_0 = \text{const}$, $\Gamma = \text{const}$, $E_0 = \text{const}$.

Кривая равновесия фаз определяется системой уравнений

$$\begin{aligned} T_1 &= T_2 = T, & \rho_1 &= \rho_2 = \rho, \\ E_1 + \rho v_1 - T S_1 &= E_2 + \rho v_2 - T S_2, \end{aligned} \quad (18)$$

где индекс "1" относится к первой фазе, индекс "2" - ко второй. Энтропия S для уравнений (17) имеет вид

$$S = c_0 \ln(T v^n) + S_0. \quad (19)$$

Подставив в (18) E из (17) и S из (19), получим

$$\begin{aligned} & \frac{c_{01}^2}{n_1} \left[\frac{\delta_1^{n_1-1}}{n_1-1} + \frac{1}{\delta_1} \right] - \frac{c_{02}^2}{n_2} \left[\frac{\delta_2^{n_2-1}}{n_2-1} + \frac{1}{\delta_2} \right] + \\ & + T \left\{ c_{v1} \left[1 - \ln(T v_1^{n_1}) \right] - c_{v2} \left[1 - \ln(T v_2^{n_2}) \right] + S_{01} - S_{02} \right\} + \\ & + \rho (v_1 - v_2) + E_{01} - E_{02} = 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Кроме того, из (17) следует

$$\rho = \frac{\rho_{01} c_{01}^2}{n_1} (\delta_1^{n_1-1}) + \Gamma_1 c_{v1} \rho_1 T, \quad (21)$$

$$\rho = \frac{\rho_{02} c_{02}^2}{n_2} (\delta_2^{n_2-1}) + \Gamma_2 c_{v2} \rho_2 T. \quad (22)$$

В (20) - (22) ρ_1 и ρ_2 плотность первой и второй фаз в области смеси, соответственно, $\delta_1 = \rho_1 / \rho_{01}$, $\delta_2 = \rho_2 / \rho_{02}$ - сжатия фаз в области смеси. Исключив из (20)-(22) ρ_1 и ρ_2 , получим зависимость ρ от T в области смеси

$$\rho = F(T) \quad \text{или} \quad T = \varphi(\rho). \quad (23)$$

Такая зависимость может быть получена лишь численно ввиду сложности уравнений (20)-(22).

Далее определяются границы каждой фазы. Для фазы "1" граница в переменных $\rho_1 v$ получается из (17) и (23) в виде

$$\rho - \frac{\rho_{01} c_{01}^2}{n_1} (\delta_1^{n_1-1}) - \Gamma_1 c_{v1} \rho \varphi(\rho) = 0. \quad (24)$$

Аналогично получается граница второй фазы

$$\rho - \frac{\rho_{02} c_{02}^2}{\pi_2} (\delta^{\pi_2} - 1) - \Gamma_2 c_{v2} \rho \varphi(\rho) = 0. \quad (25)$$

В каждой отдельной фазе внутренняя энергия и давление вычисляются с помощью уравнений (5) или (13) и следствия из (17)

$$\rho = \rho_x(\rho) + \Gamma_1 \rho [E - E_x(\rho)]. \quad (26)$$

В области смеси фаз для получения связи между ρ, v и E привлекается уравнение

$$\left(\frac{\partial E}{\partial v}\right)_T = T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_v - \rho,$$

которое после интегрирования по v вдоль изотермы, являющейся здесь и изобарой, принимает вид

$$E - E_* = \left[-\frac{\varphi(\rho)}{\frac{d\varphi(\rho)}{d\rho}} - \rho \right] (v - v_*). \quad (27)$$

Здесь E_* и v_* значения энергии и удельного объема, взятые на границе области смеси. E_* и v_* зависят, очевидно, только от ρ . Из (17), (23), (24) и (27) получим

$$E = \left[\frac{\varphi(\rho)}{\frac{d\varphi(\rho)}{d\rho}} - \rho \right] (v - v_*) + c_{v1} \varphi(\rho) + \frac{c_{01}^2}{\pi_1} \left[\frac{\delta_*^{\pi_1 - 1}}{\pi_1 - 1} + \frac{1}{\delta_*} \right] + E_{01}. \quad (28)$$

$$\rho = \frac{\rho_{01} c_{01}^2}{\pi_1} (\delta_*^{\pi_1} - 1) + \Gamma_1 c_{v1} \rho_* \varphi(\rho) \quad (29)$$

Эти уравнения после исключения v_* дадут связь между ρ, v и E .

Изложенный выше алгоритм и уравнение состояния были применены для расчета взрыва в веществе с параметрами

$$\begin{aligned} \rho_{01} &= 2,6; \quad \rho_{02} = 4,3; \quad c_{01} = 4,3; \quad c_{02} = 9,7; \\ \pi_1 &= 4, \quad \pi_2 = 2,7, \quad c_{v1} = c_{v2} = 1,2 \cdot 10^7; \quad \Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,548; \\ S_{01} &= 0, \quad E_{01} = 0; \quad S_{02} = 1,5 \cdot 10^5; \quad E_{02} = 1,63 \cdot 10^{10}; \\ [\rho] &= 2/см^3; \quad [c_0] = км/сек; \quad [c_v] = [S] = 992/2 \cdot 9922, \quad [E_0] = 2,02 \cdot 2. \end{aligned} \quad (30)$$

На рис.2 изображены границы фаз (линии η_{13} и η_{23}), ударная адиабата ρ_r и изэнтропа ρ_s вещества с параметрами (30). Это вещество напоминает кварц с учетом его перехода в плотную фазу-стишовит. Константы (30) рекомендованы К.К.Крупниковым.

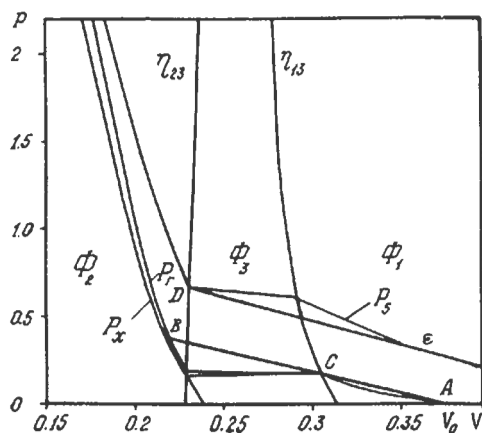


Рис.2.

При $t=0$ в среде было $P=0$, $\rho=\rho_{01}$, $E=0$, $u=0$. В центре системы задавался пузырек газа, расширение которого имитировало точечный взрыв.

Результаты расчета приведены на рисунках 3, 4, 5.

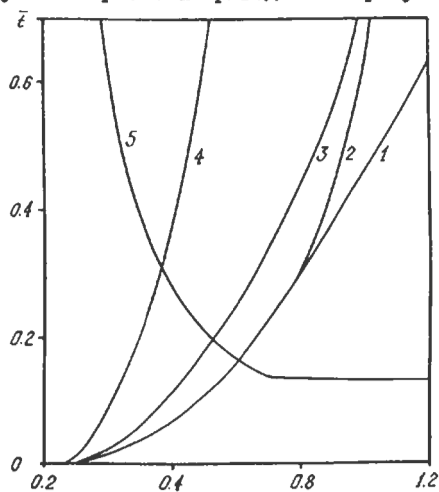


Рис.3.

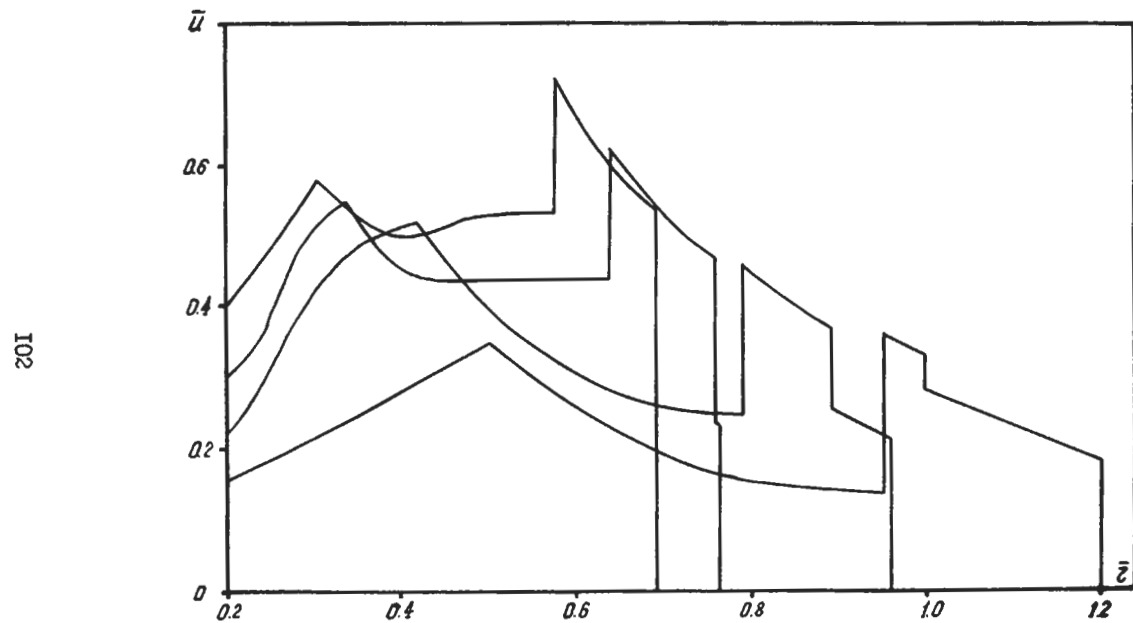


Рис. 5.

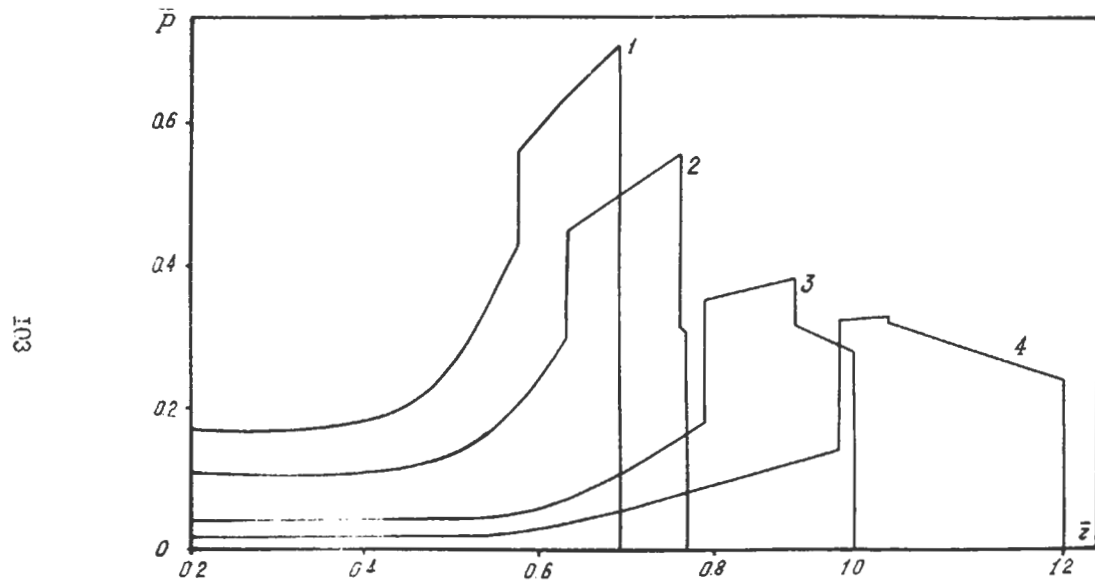


Рис. 4.

На рис.3 в безразмерных переменных $\bar{r} = r/r_g$, $\bar{t} = c_0 t/r_g$, где $r_g = [Q/(\rho_0 c_0^2)]^{1/3}$, Q - начальная энергия газа, изображена траектория первой ударной волны-1, траектория второй ударной волны-2, возникшей после расщепления первой, траектория ударной волны разрежения-3 и 4 - граница, отделяющая вещество от продуктов взрыва (идеальный газ с $\gamma = \frac{4}{3}$). Вначале от центра взрыва распространяется сильная ударная волна, за которой следует волна разрежения. В некотором месте волны разрежения образуется скачок разрежения с состоянием перед фронтом, соответствующим точке Д (рис.2). Давление за фронтом этого скачка продолжает падать. В этом случае условие механической устойчивости скачка требует, чтобы параметры за его фронтом соответствовали бы точке ε , в которой луч $D\varepsilon$ касается изэнтропы ρ_s . Таким образом, α характеристики выходящие из центра, не догоняют скачок разрежения, поскольку он движется относительно вещества за фронтом точно со скоростью звука. В то же время скачок разрежения является источником α - характеристик, догоняющих фронт ударной волны сжатия, т.к. скачок разрежения движется с дозвуковой скоростью относительно вещества фазы 2 (в точке Д рис.2). Когда давление на ударной волне упадет до давления в точке В (рис.2), волна расщепляется. После расщепления 2-я волна продолжает быстро затухать. Вещество, по которому движется вторая ударная волна, само движется от центра, т.е. давление и плотность в нем падают, однако условие устойчивости второй волны требует, чтобы точка, соответствующая состоянию перед фронтом, все время располагалась на границе I -й фазы. Это приводит к тому, что вторая ударная волна непрерывно испускает вперед звуковые волны сжатия, т.е. для вещества, находящегося в фазе I, она служит своеобразным краевым условием. Закон затухания первой ударной волны определяется, таким образом, двумя факторами: сферичностью, ослабляющей волну, и волной сжатия, усиливающей ее. В результате изменение скорости D первой ударной волны до расщепления и после расщепления резко различаются. Зависимость $\bar{D} = D/c_0$ от \bar{r} приведена на рис.3 (кривая 5).

Видно, что после расщепления скорость первой ударной волны меняется очень медленно. Расчеты позволяют определить отношение значения коэффициента затухания ударной волны

$$\alpha_2 = d \ln \rho / d \ln \bar{r} \text{ после расщепления к значению } \alpha, \text{ до}$$

расщепления $\alpha_2/\alpha_1 \approx 0,13$.

На рис.4 приведены распределения безразмерного давления $\bar{p} = p/\rho_0 c_0^2$ в различные моменты времени (1 - до раздвоения первой ударной волны, 2,3,4 - после). Аналогичные распределения безразмерной скорости $\bar{u} = u/c_0$ изображены на рис.5. Видно, что за фронтом первой ударной волны происходит заметное увеличение как давления, так и скорости, которые затем резко спадают на фронте ударной волны разрежения.

Авторы благодарят Н.К.Голубеву за создание отдельных блоков программы РАНЦ и проведение расчетов.

Л и т е р а т у р а .

1. J. Wacke, „Shock-Wave Compression of Quartz“, *Journal Appl. Phys.*, vol. 33, №1, 1962, 922.
2. "Твердые тела под высоким давлением", изд. "Мир", М, 1966.
3. Р.И.Нигматуллин. Модель движения и ударные волны в двухфазных твердых телах с фазовыми переходами. ПМТФ, №1, 88, 1970.
4. Г.Г.Виленская, И.В.Немчинов. Численный расчет движения и нагрева излучением ОКГ плазмы, образовавшейся при вспышке поглощения в парах твердого тела. ПМТФ, №6, 1969.
5. В.Ф.Куропатенко, Б.К.Потапкин, А.Т.Сапожников. Расчет неустановившихся течений газа типа Ван-дер-Ваальса в трубопроводах постоянного сечения. Изв. СО АН СССР, сер.тех. №13, вып.3, 1967.
6. В.В.Гаджиева, В.Ф.Куропатенко, А.Т.Сапожников. Структура вязкого скачка в среде с фазовым переходом второго рода. Труды Всесоюзного семинара по численным методам механики вязкой жидкости. Наука, 60, 1969.
7. В.Ф.Куропатенко. О разностных методах для уравнений гидродинамики. Труды МИ АН СССР, т.74, г.1, 107, 1966.
8. В.Ф.Куропатенко. Приближенный метод расчета величин за фронтом ударной волны. Числ.мет. мех. спл. среды, инф. бюллетень, т.1, №6, 77, 1970.