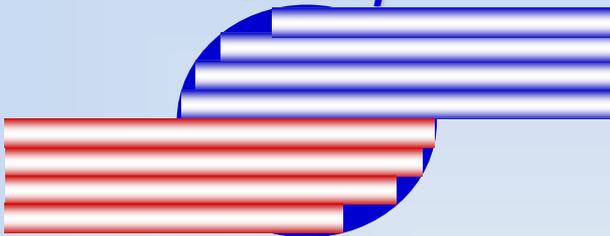


РФЯЦ



ВНИИТФ

В.Ф. Куропатенко

***Эксперимент и
математическое
моделирование в механике
сплошных сред***

***Всероссийская конференция
«Взрыв в физическом эксперименте»***

***16 – 20 сентября 2013 г.
г. Новосибирск***

Физика взрыва

- Механика взрыва – наука о поведении вещества под действием динамических нагрузок - получила мощный импульс в 50-х годах прошлого века в связи с разработкой ядерного оружия.
- При ударном сжатии или импульсном нагреве вещества потоком излучения возникают большие концентрации энергии. Они приводят к перестройке кристаллической структуры вещества, плавлению, испарению, диссоциации и ионизации. Необходимость моделировать свойства вещества в широком диапазоне изменения давления, плотности и температуры привела к бурному развитию компонентов триады

эксперимент – модель – прогноз

или

от частного к общему, от общего к частному.

Механика сплошных сред (МСС)

К началу XX века были созданы основы МСС:

- Понятие сплошной среды.

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

- Закон сохранения количества движения

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

- Закон сохранения энергии $\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla (\mathbf{P} + \rho \varepsilon) \bar{\mathbf{u}} = \nabla \bar{\mathbf{q}} + \frac{\partial \bar{\mathbf{s}}_k \bar{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{x}_k}$,
где $\varepsilon = E + 0,5 \bar{\mathbf{u}}^2$.

- Уравнения состояния $P(\rho, E)$ или $P(\rho, T)$, $E(\rho, T)$.

- Определяющие уравнения (упругость, пластичность, вязкость).

- Инвариантность к преобразованию Галилея.

Эволюция МСС

До середины XX столетия, т.е. до появления ЭВМ, развитие МСС шло по пути аналитических решений. Резкое различие свойств агрегатных состояний веществ определило разделение МСС на ряд направлений (гидродинамика, газодинамика, аэродинамика, теория упругости, теория пластичности, теория детонации и др.). В каждом из направлений строились свои аналитические решения, с помощью которых получались требуемые промышленностью прогнозы характеристик физических процессов и оценивались параметры разрабатываемых машин.

Несмотря на то, что аналитические решения получались для упрощённых постановок задач и упрощенных уравнений состояния, их ценность несомненна. В этот период были получены прекрасные аналитические решения, которые были востребованы при создании новой техники в авиации, кораблестроении, космонавтике, при решении оборонных задач.

Это решение задачи о точечном взрыве, автомодельные решения о распространении ударных и детонационных волн и движениях оболочек, о разлете продуктов взрыва, о течениях несжимаемой вязкой жидкости и ряд других.

МСС накануне появления ЭВМ

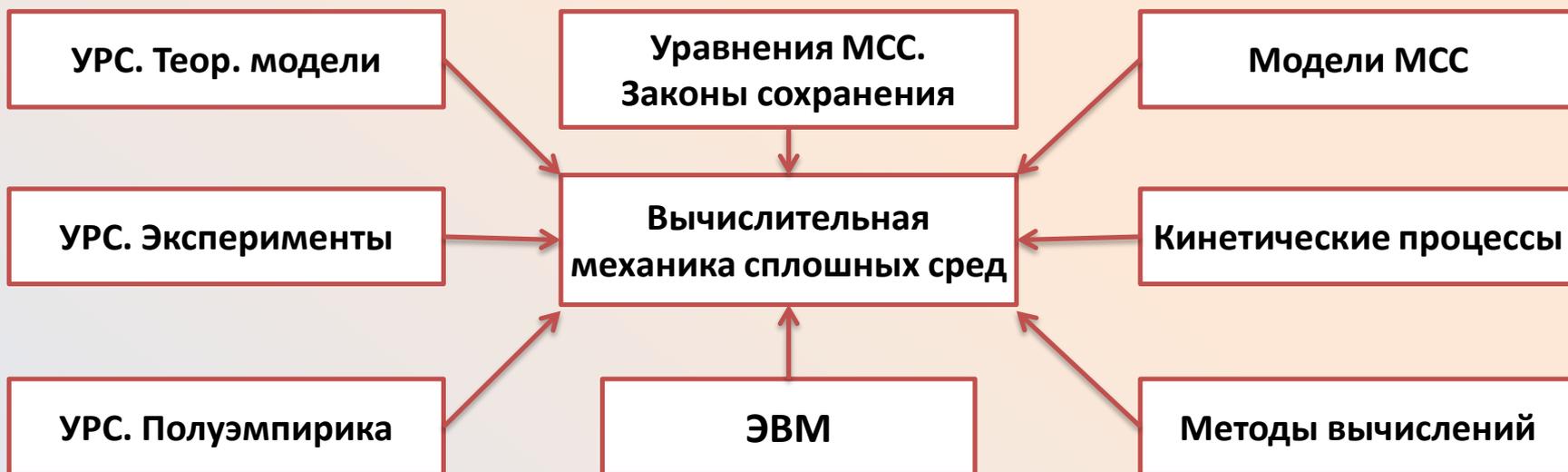
Успехи механики сплошных сред, достигнутые к середине XX века в области создания моделей и аналитических решений, ярко изложены в следующих работах:

1. **Я.Б.Зельдович.** Теория ударных волн и введение в газодинамику. Изд.АН СССР, 1946.
2. **Н.Е.Кочин, И.А.Кибель, Н.В.Розе.** Теоретическая гидромеханика. Гостехиздат, 1948.
3. **Г.Курант, К.Фридрихс.** Сверхзвуковое течение и ударные волны. ИИЛ. 1950.
4. **А.Ферри.** Аэродинамика сверхзвуковых течений. Техтеорлит. 1953.
5. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Механика сплошных сред. Гостехиздат. 1954.
6. **К.П.Станюкович.** Неустановившиеся движения сплошной среды. Гостехиздат. 1955.
7. **Ф.А.Баум, К.П.Станюкович, Б.И.Шехтер.** Физика взрыва. Физматгиз, 1959.
8. **Л.И.Седов.** Введение в механику сплошной среды. Физматгиз, 1962.
9. **В.Прагер.** Введение в механику сплошных сред. ИИЛ. 1963.

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.



Рывок в развитии МСС

Появление ЭВМ создало новые условия для развития МСС. Появилась 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.
- **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.

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. Фортон.** Взрывные ударные трубы // ТВТ. 1982, т. 80, № 4.
3. **А.В. Бушман, В.Е. Фортон.** 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.

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.*

Появление Вычислительной МСС

Новая наука **Вычислительная МСС** создавалась и развивалась очень быстро из-за потребностей обороны. При разработке ядерного оружия специфика работ определялась тремя факторами:

- Невозможностью провести натурные испытания ядерного заряда в лабораторных условиях.
- Хроническим отставанием отечественной вычислительной техники по основным параметрам от ЭВМ США.
- Необходимостью создания конструкций ядерного оружия, не уступающих по своим характеристикам создаваемым в США.

Целью всех проводимых работ было создание системы моделей и методов для обеспечения высокой точности моделирования динамических процессов в ЯЗ.

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:

Характер аппроксимации
Критерии устойчивости
Дистракцию

Диссипативность
Монотонность
Консервативность

- Вычислительная МСС состоит **ФАКТИЧЕСКИ** из двух блоков: разностных методов и моделей МСС. Основа вычислительной МСС – математическая модель – возможна только при условии тесного взаимодействия разностных методов и моделей МСС.



Структура моделей МСС

Адиабатическое ядро \equiv уравнения Эйлера-Гельмгольца и УРС.



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 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

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

Особенности современных УРС

Для каждой i -ой фазы вещества задаются сколь угодно сложные зависимости $P_i = P_i(V_i, E_i)$, $T_i = T_i(V_i, E_i)$, удовлетворяющие всем термодинамическим условиям. Границы фаз – это слабые разрывы изотерм и изэнтроп

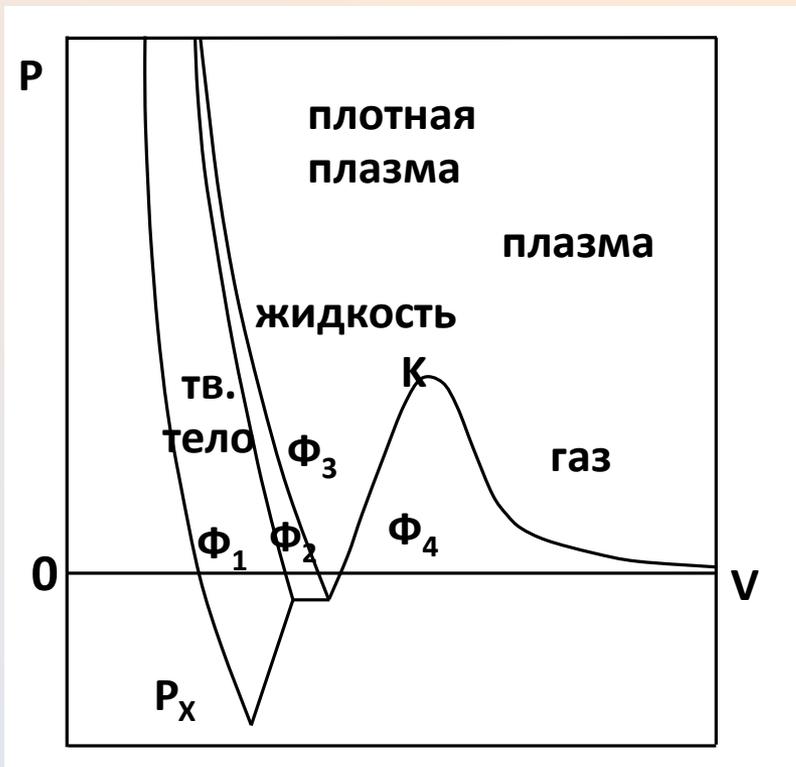
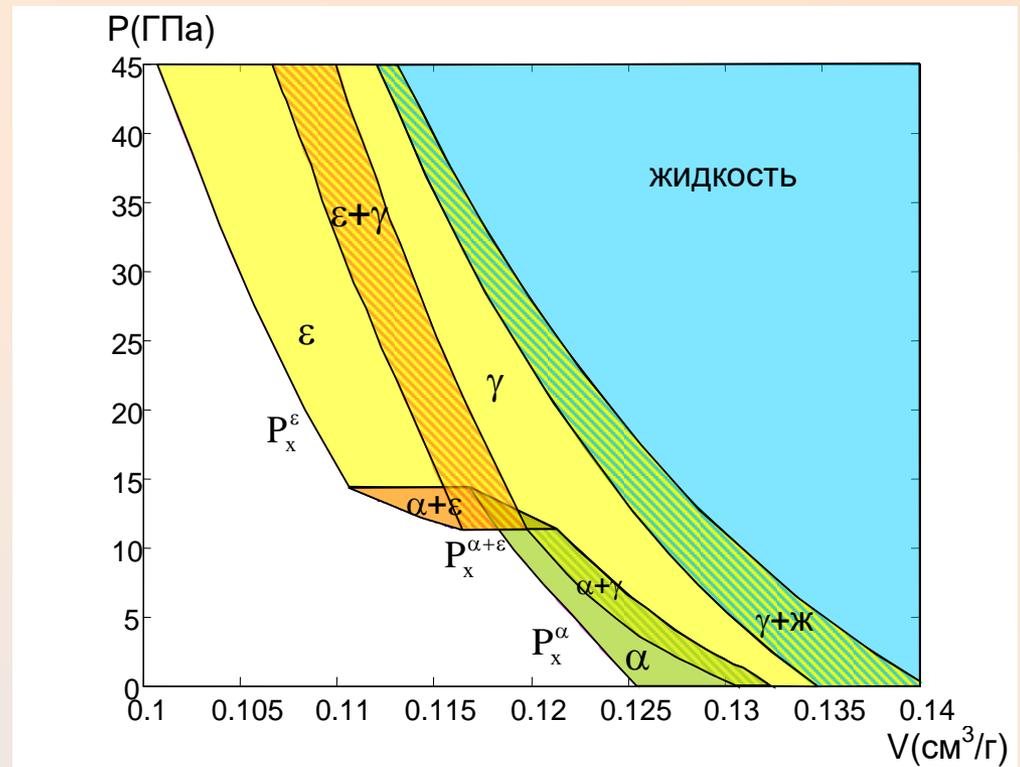


Схема агрегатных состояний в плоскости P, V



Уравнение состояния железа в плоскости P, V (Дремов В.В.)

Однородные методы расчета ударных волн

Каждый сильный разрыв заменяется непрерывным течением в слое конечной ширины (дистракция). В этом слое растет энтропия (диссипация энергии).

Известно 4 принципиально разных механизма диссипации энергии.

Год первой публикации	Авторы метода расчета	Страна	Механизм диссипации энергии
1950	Д. Нейман, Р. Рихтмайер [1]	США	Псевдовязкость
1954	П. Лакс [2]	США	Аппроксим. вязкость
1957	С.К. Годунов [3]	СССР	Распад произв. разрыва
1960	В.Ф. Куропатенко [4]	СССР	Уравнения Гюгонио

1. Neumann J., Richtmayer R. A method for the numerical calculation of hydrodynamical shocks //J. Appl. Phys. – 1950. – V.21, №3 – pp.232-237.

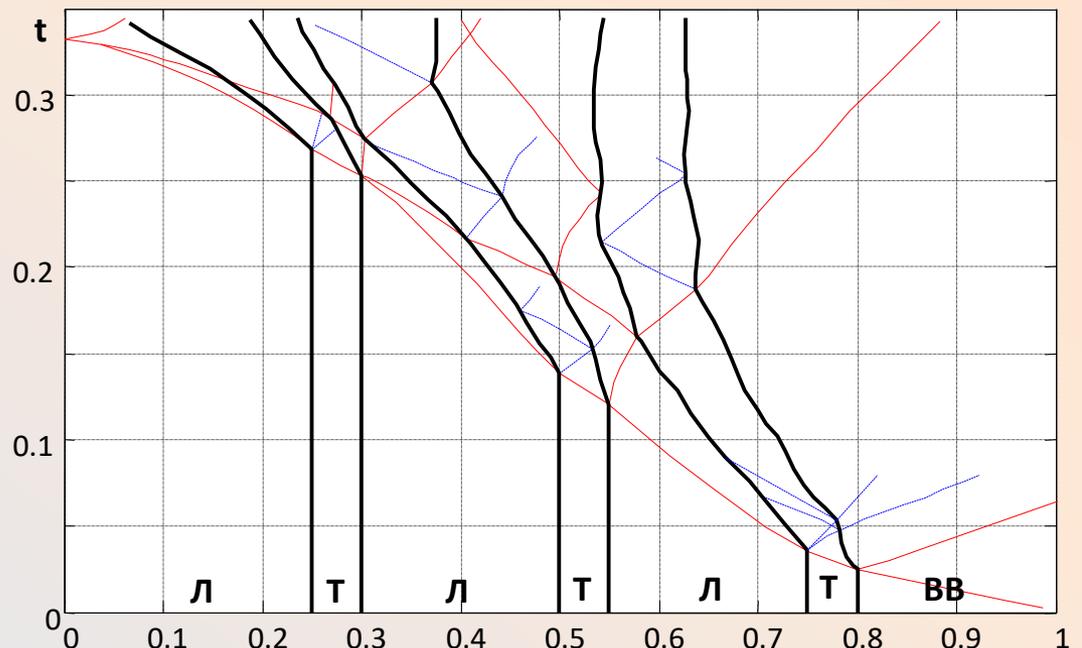
2. Lax P.D. Weak solution of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computations //Comm. Pure and Appl. Math. – 1954. – V.7 – pp.159-193.

3. Годунов С.К. Разностный метод расчета ударных волн //УМН-1957.-т12, вып.1.-с.176-177

4. Куропатенко В.Ф. Метод расчета ударных волн //ДАН СССР.– 1960. – В.3, №4. – С. 771-772.

Неоднородный метод

В 1965 г. в РФЯЦ-ВНИИТФ был создан неоднородный метод расчета нестационарных движений сплошных сред, в котором выделяются все существенные разрывы. Его применение устранило образование энтропийных следов возле контактных границ и в зонах взаимодействия ударных волн и резко повысило точность расчетов в целом.



На рисунке приведена картина сильных, слабых и контактных разрывов в переменных r, t в сферической многооболочечной конструкции после взрыва наружного слоя ВВ.

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 различных технологических процессах,
- Взаимодействие тел при высокоскоростных и низкоскоростных соударениях с целью отыскания средств защиты и оптимизаций средств поражения,
- Горение топлива в камерах двигателей,
- Процессы в тепловых, атомных и других электростанциях с целью оптимизации существующих и поиска новых источников энергии,
- Движение крови в кровеносных сосудах.

Проще назвать те области человеческой деятельности, где ЭВМ не применяются.

Обратная сторона триумфа

- **Любая модель является приближенной, тем более математическая модель.** Отсутствие указания на приближенность модели в Вычислительной МСС порождает формально-математический подход к интерпретации результатов расчетов. Выдавая поток цифр, ЭВМ отрывает их от модели, как бы экранирует модель от пользователя и избавляет его от понимания её достоинств и недостатков.
- **Доступность ЭВМ** сделала мат. моделирование массовым занятием. Освоив ЭВМ, легко ввести в неё любую «новую» модель. Подобрал значения эмпирических параметров, можно даже описать несколько экспериментов, но на этом пути нельзя получить средство для прогнозирования других экспериментов. Такие результаты взаимодействия ЭВМ и пользователя вызывали и продолжают вызывать тревогу.
- **Седов Л.И. (1976):** «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).
- **Новожилов В.В. (1983):** «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!

Недостатки Вычислительной МСС

Все математические модели содержат эмпирические параметры, которые определяются не из теории, а из условия совпадения расчетов с базовым экспериментом. Конечная погрешность расчетов имеет вид:

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4 + \Delta_5 +$$

где

- Δ_1 - погрешность разностных уравнений
- Δ_2 - погрешность УРС,
- Δ_3 - погрешность определяющих уравнений,
- Δ_4 - погрешность состояния образца,
- Δ_5 - погрешность постановки расчета.

Экспериментальные данные также имеют погрешность.

Т.о. определение эмпирических параметров модели возможно только при взаимной компенсации указанных погрешностей.

Для систем, далеких от базовой, результаты расчетов и экспериментов могут отличаться.

Источники погрешностей разностных уравнений

В результате применения однородных методов, «размазывающих» ударные волны и слабые разрывы, в решении возникают **энтропийные следы**:

- При взаимодействии сильных разрывов друг с другом,
- При взаимодействии сильных разрывов с контактными границами,
- При распространении разрывов по сетке с переменным шагом.

Энтропийные следы необратимы.

Взаимодействие последующих ударных волн с энтропийными следами полностью искажает распад произвольного разрыва. Конечная погрешность возрастает. Она не уменьшается при увеличении числа точек сетки.

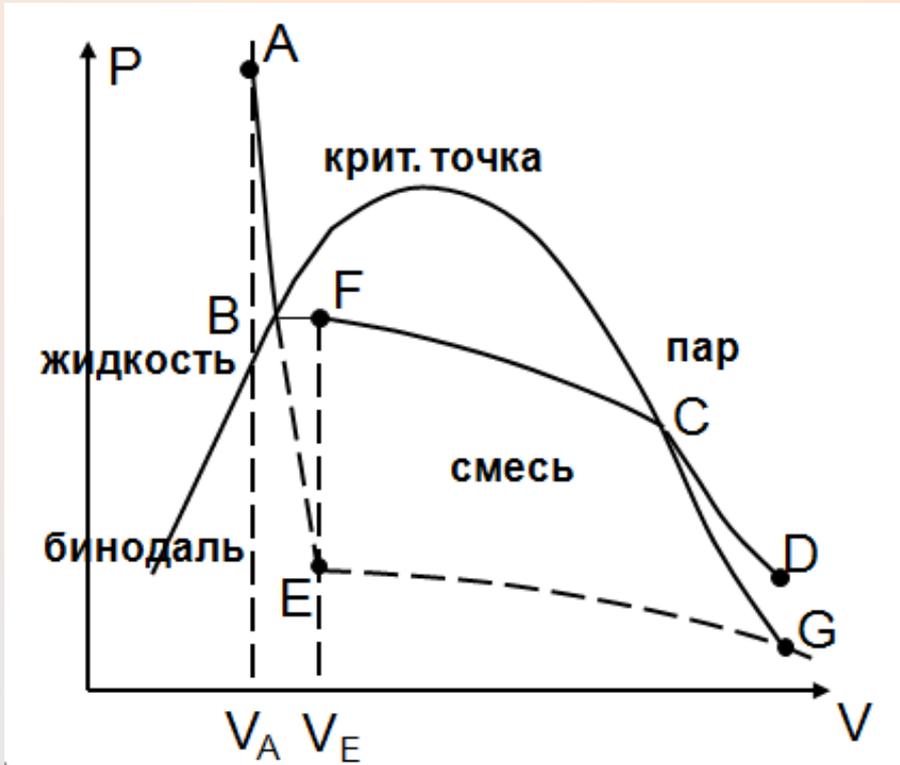
Многие однородные методы сильно диссипативны, т.е. на непрерывных решениях энтропия меняется сильнее, чем на слабых ударных волнах.

$$T\Delta S = -\frac{1}{12} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_s \Delta V^3$$

Ошибки при моделировании фазовых переходов

- Современные УРС описывают фазовые переходы. Границы фаз неподвижны в пространстве термодинамических переменных. При моделировании процессов с фазовыми переходами «механическая» скорость движения вдоль изэнтропы **НЕ коррелирует** со скоростью $\frac{d\alpha}{dt}$ образования новой фазы. Эта скорость должна рассчитываться в прикладной программе с помощью кинетического уравнения, когда вещество пересекло границу фазы.
- Примерно 90% применяемых в МСС программных комплексов этого делать не умеют. Это очень распространенная причина конечных ошибок.

Ошибки при изменении фазы



На рисунке изображена изэнтропа разгрузки ABCD, пересекающая границу жидкости.

В уравнении неразрывности

$$\frac{dv}{dt} - v \nabla \bar{u} = 0 \quad (1)$$

отсутствует информация о фазовом состоянии вещества.

В момент t вещество находится в точке A с параметрами P_A, V_A .

Через время Δt из разностного аналога уравнения (1) находится значение $V_E = V(t + \Delta t)$.

- Если алгоритм «умеет» определять точку B пересечения изэнтропы с бинодалью, то разгрузка пойдёт по изэнтропе в точку $F (P_F, V_F)$.
- Если нет, то будет найдено значение P_E , и дальнейшая разгрузка пойдёт по другой изэнтропе EG , где $S_E < S_F$.

Возникла конечная ошибка.

Ошибки при расчете отколов

Погрешность математического моделирования откольного разрушения состоит из погрешности модели $\Delta_{\text{физ}}$ и погрешности численного метода $\Delta_{\text{мат}}$

$$\Delta = \Delta_{\text{физ}} + \Delta_{\text{мат}}.$$

Для оценки $\Delta_{\text{мат}}$ используются аналитические решения для трёх возможных типов отколов :

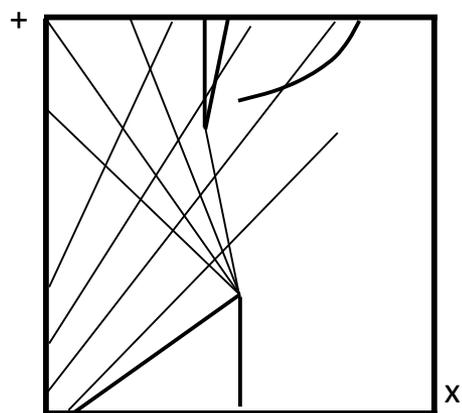


Рис. 1

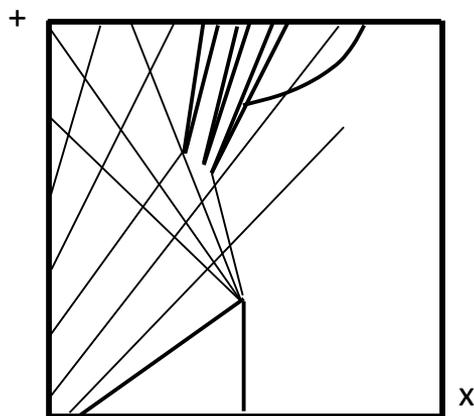


Рис. 2

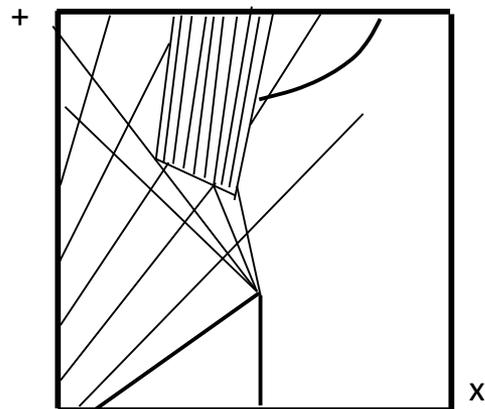


Рис. 3

1. Одиночный откол. 2. Множественный откол. 3. Откол с дроблением вещества.

Однородные методы с «размазыванием» разрывов в принципе не могут описать ни одно из указанных решений.

Моделирование откола

Однородные методы: сильные и слабые разрывы «размазываются»
(Пунктирные линии на Рис. 1.2).

Неоднородные методы: сильные и слабые разрывы **НЕ** «размазываются»
(Сплошные линии на Рис. 1.2).

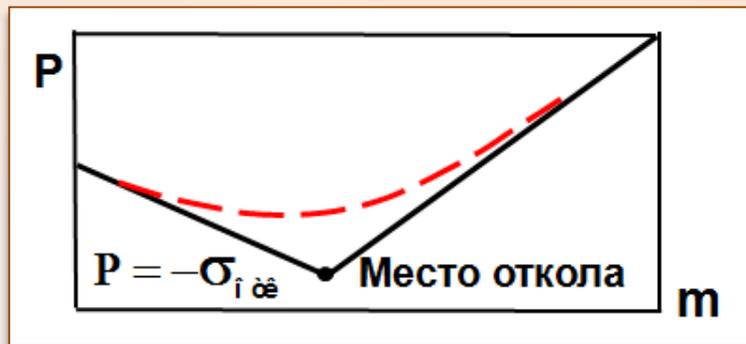


Рис. 1. Момент откола

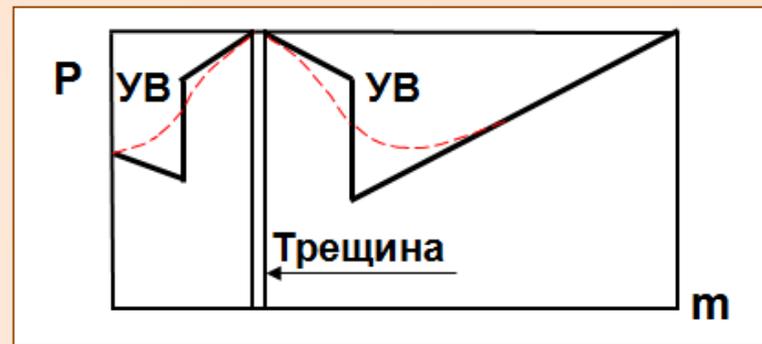


Рис. 2. Через Δt после откола

При $P_- < 0$ на фронте УВ **внутренняя энергия уменьшается**

$$E - E_- = -0,5P_-(V - V_-).$$

Поскольку $P = 0$, $V - V_- < 0$, $P_- < 0$, то $E - E_- < 0$.

В однородных же методах **внутренняя энергия растёт**

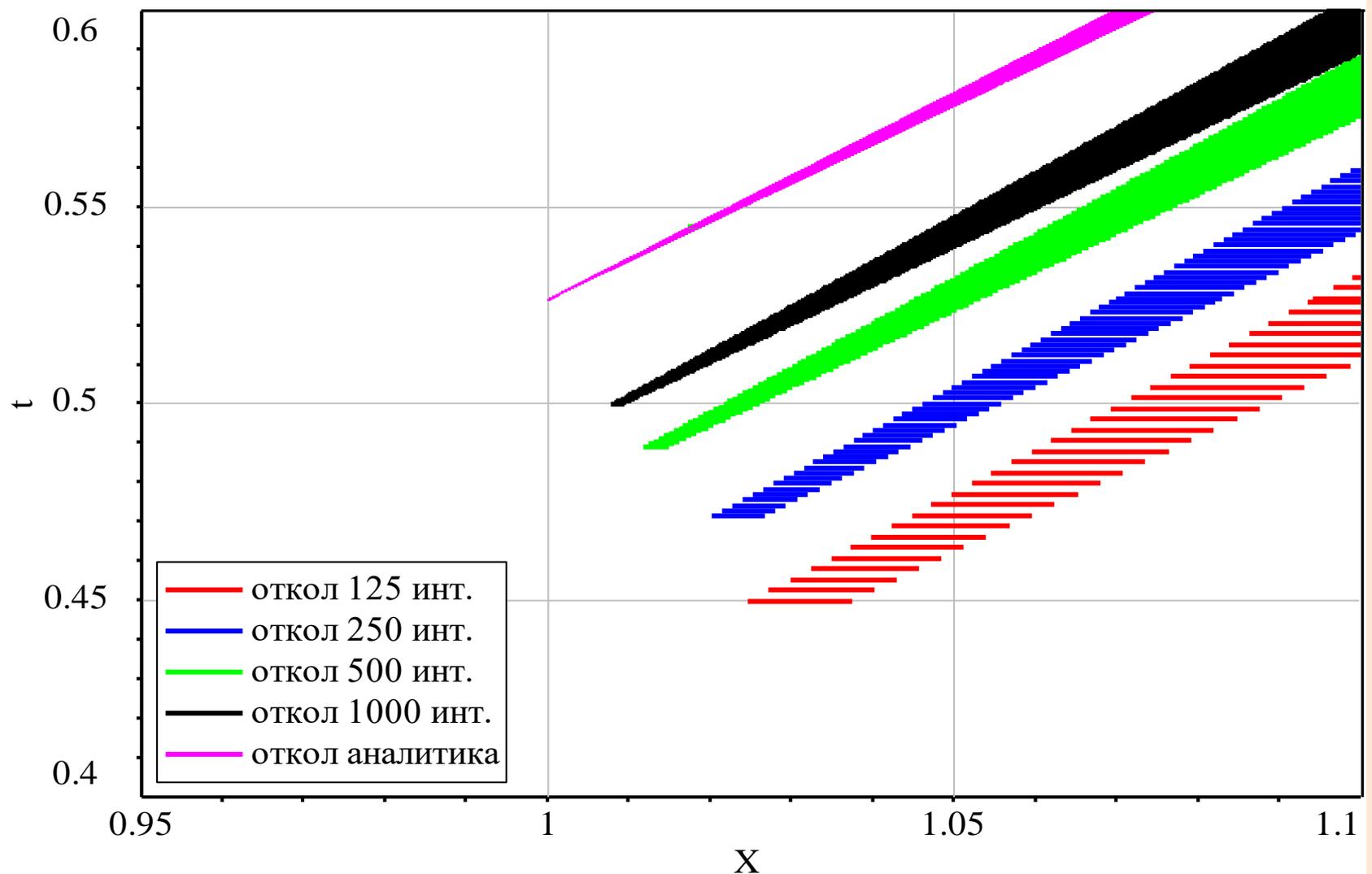
$$E - E_- = -(0,5P_- + q)(V - V_-).$$

Поскольку $V - V_- < 0$, $q > 0$, $0,5P_- + q > 0$, то $E - E_- > 0$.

Любой однородный метод рассчитывает откол неправильно.

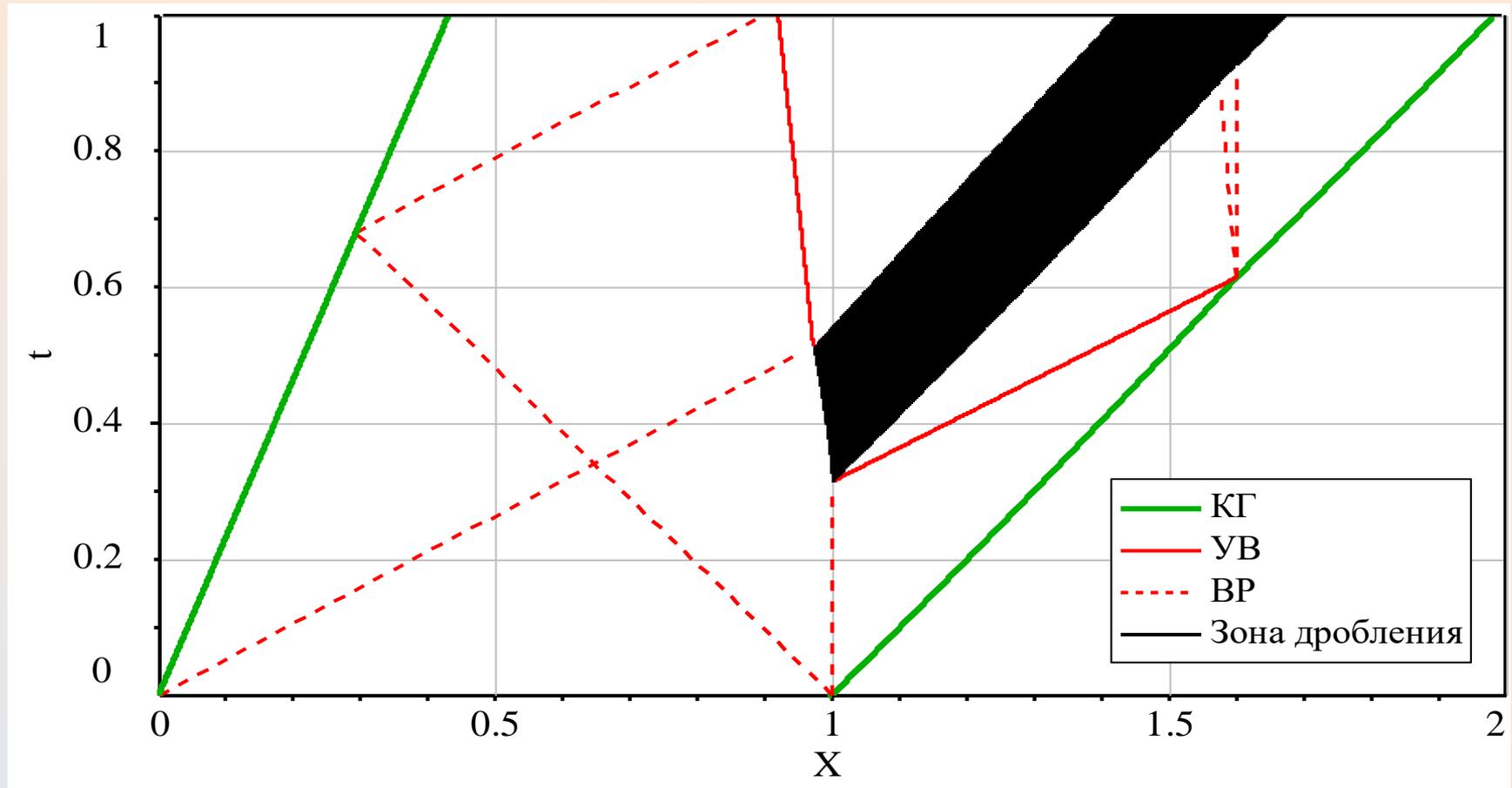
Откольное разрушение. Уединенный откол.

Фрагмент X-t-диаграммы, однородный метод



Откол с дроблением. Аналитическое решение.

X-t-диаграмма.

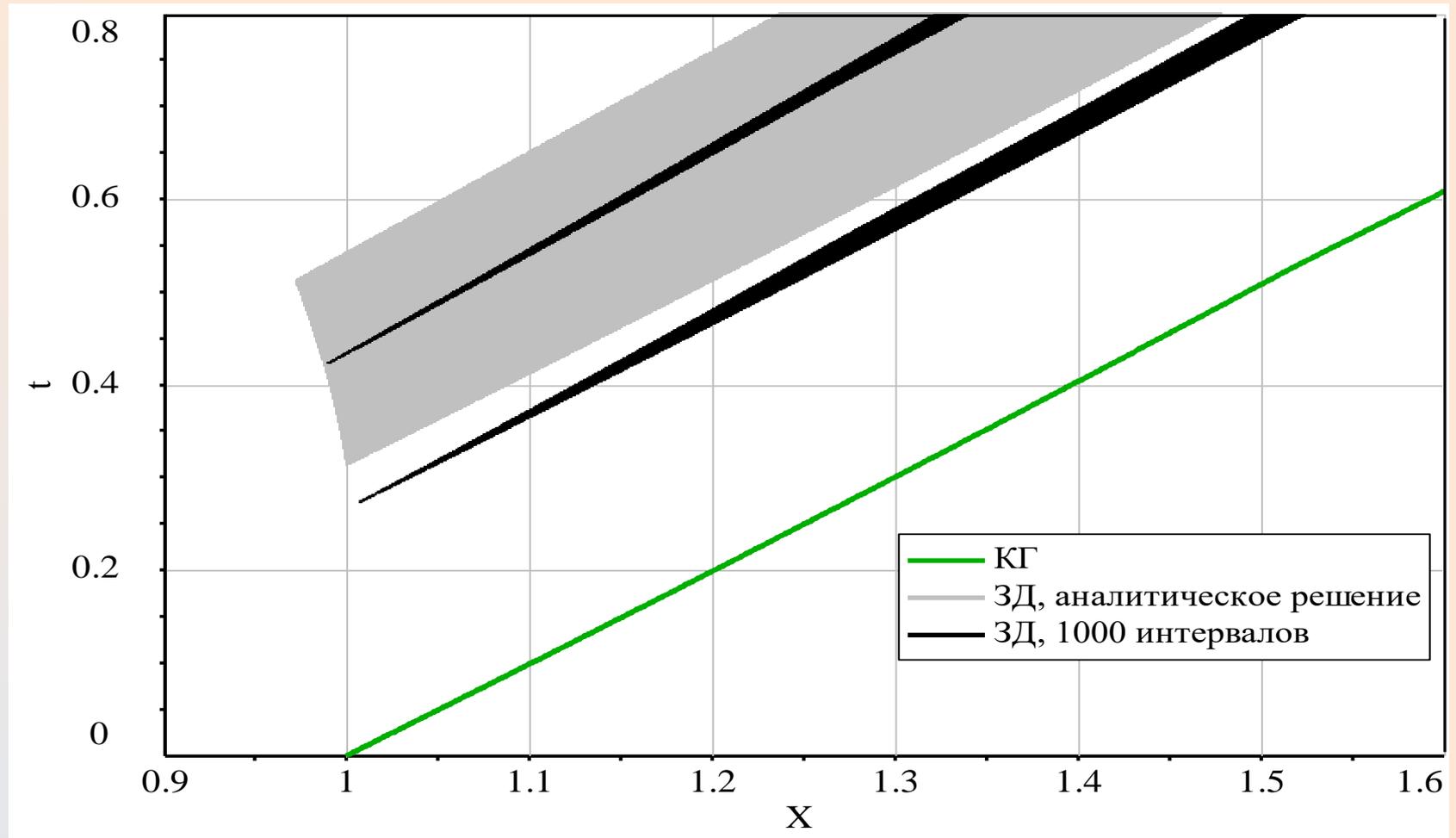


$$t_{\sigma}(X) = \frac{1}{8C_{\sigma}(U_1 - U_L)} \left[X_1(U_1 + C_1 - 2C_{\sigma}) + \sqrt{X_1^2(U_1 + C_1 - 2C_{\sigma})^2 + 16C_{\sigma}(U_1 - U_L)X_1(X_1 - X)} \right]$$

$$C_{\sigma} = \left[(3\sigma + 1) \frac{C_1}{\rho_1} \right]^{\frac{1}{3}}$$

Формула линии уровня $P = \sigma_{\text{отк}} = -0.041$

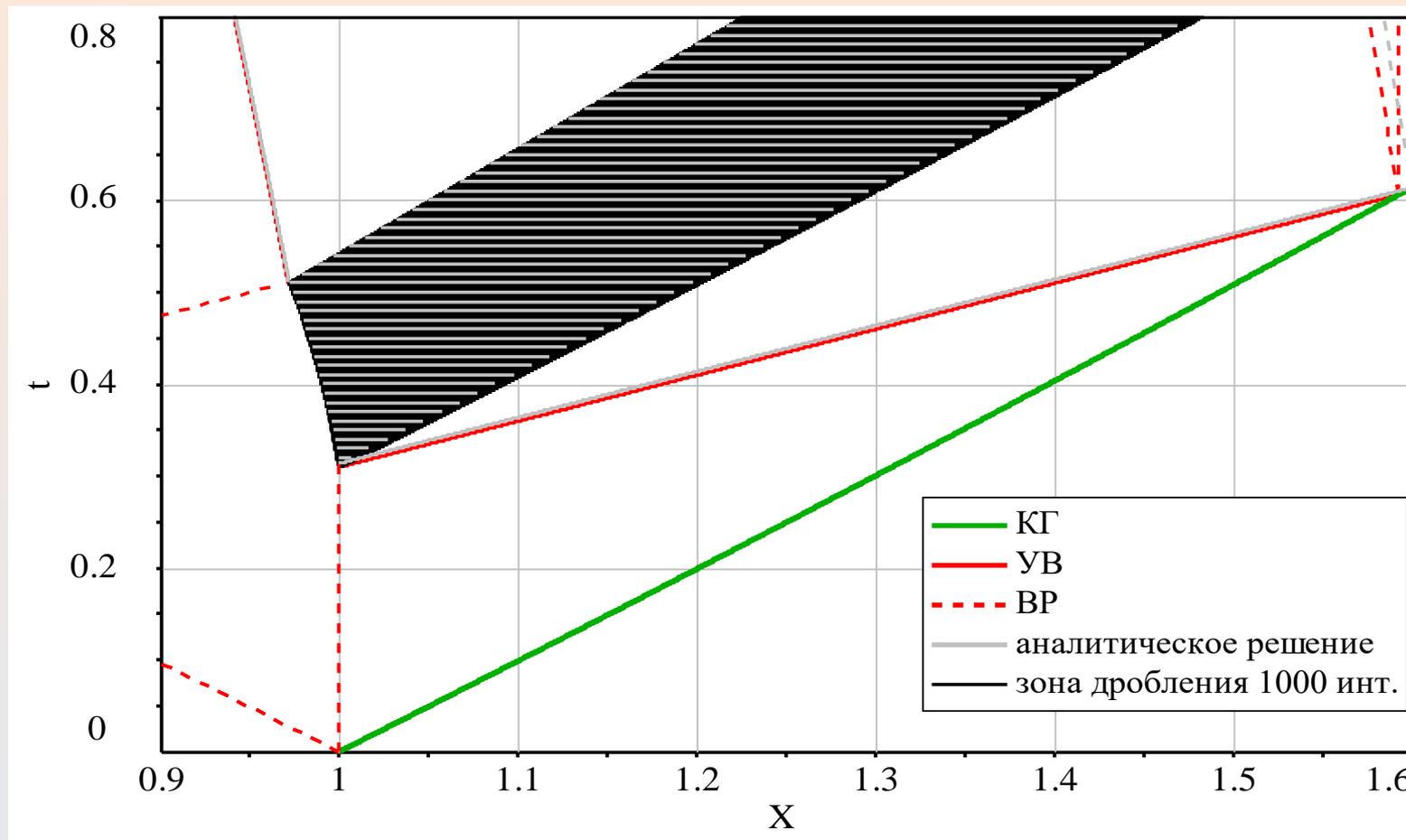
Откольное разрушение. Откол с дроблением.



Фрагмент X - t -диаграммы зоны дробления. Аналитическое решение. Расчет однородным методом с $N=1000$.

Откол с дроблением

Сравнение результатов расчета с аналитическим решением



Фрагмент X-t-диаграммы зоны дробления. Неоднородный метод. Выделяются слабые разрывы и ударные волны в точке разрушения.

Предельное, но не точное решение

Все свойства разностной схемы математики проверяют на равномерных сетках. Все расчёты реальных систем проводятся на неравномерных сетках. На них при $N \rightarrow \infty$ $h \rightarrow 0$ предельное решение отличается от точного решения. Пример.

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_0 T^\alpha \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0.$$

При $t=0$ $T(x)=0$, при $t \geq 0$ на границе при $x=0$ $T(t) = \left(\frac{\alpha D_0^2 t}{K_0} \right)^{\frac{1}{\alpha}}$.

Точное решение $T(x,t) = \left(\frac{\alpha D_0}{K_0} (D_0 t - x) \right)^{\frac{1}{\alpha}}$.

Аппроксимируем исходное уравнение разностным уравнением

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_1 T^\alpha \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \omega(h) = 0,$$

где $K_1 = K_0 \frac{h_{i+1} + 2h_i + h_{i-1}}{4h_i}$.

Если сетка задана по геометрической прогрессии со знаменателем 2,

то $K_1 = \frac{9}{8} K_0$ и при $h \rightarrow 0$ интегральная погрешность равна примерно 6%.

Предельное решение

Бытует великое заблуждение:

*Если хочешь повысить точность расчетов,
увеличь число N точек сетки.*

В действительности предельное решение, получающееся при $N \rightarrow \infty$ всегда отличается от точного решения. При увеличении N результат приближается к предельному решению.

На Рис. изображена зависимость времени образования откола t_p в задаче об уединенном отколе от числа точек сетки N в расчете однородным методом.

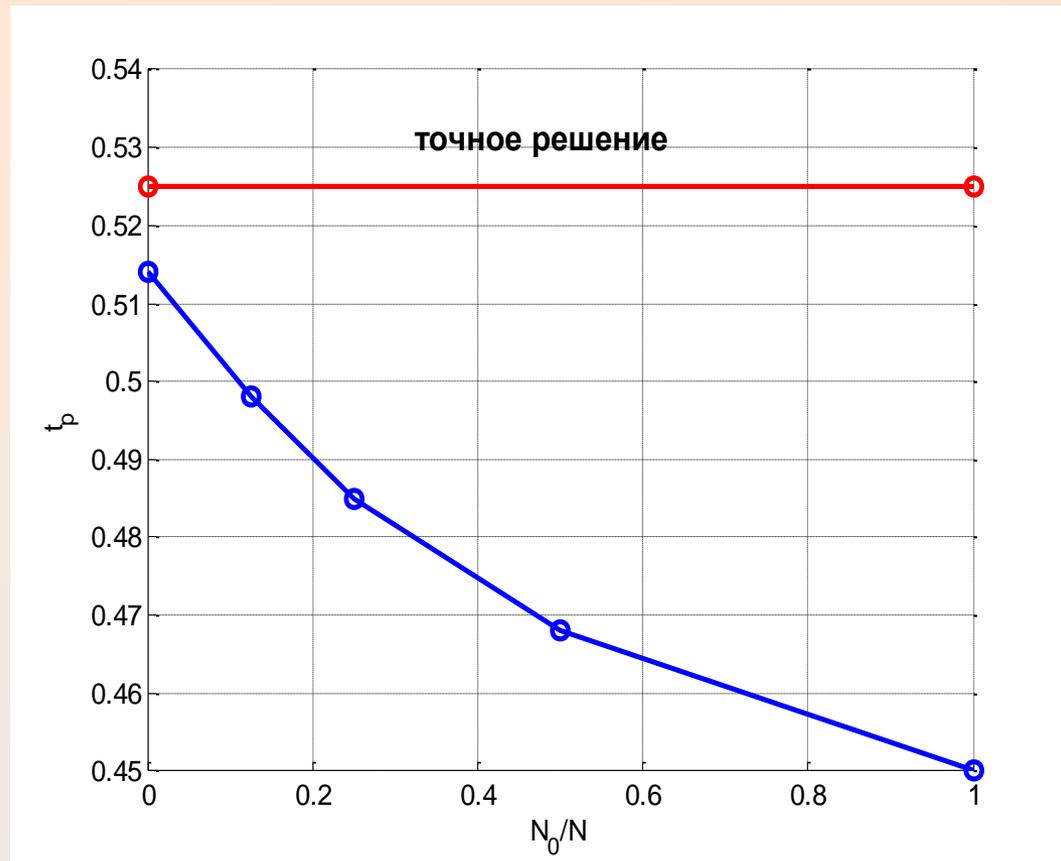


Рис. Сходимость t_p

Цели и пути развития МСС

Пора прекратить подгонку под эксперимент с помощью моделей структурно однородных сред с простейшими УРС. Вычислительная механика должна прогнозировать количественные характеристики любого физического процесса, т.е. предсказывать результаты эксперимента без эмпирических параметров. Это возможно только с помощью моделей нового поколения.

Двигаться к этой цели можно двумя путями.

- 1. Модели, основанные на гипотезе сплошной среды, далеко не исчерпали своих возможностей. Для уменьшения погрешности математического моделирования нужно совершенствовать каждую компоненту математической модели в отдельности.**
- 2. Использовать модели, сочетающие континуальное описание вещества с дискретным:**
 - Модели частиц в ячейках
 - Модели молекулярной динамики
 - Модели мезоуровневой пластичности
 - Модели многокомпонентных сред.

Ближайшие задачи ВМСС

1. Внедрение неоднородных методов, выделяющих сильные, слабые и контактные разрывы в одномерной, двумерной и трехмерной постановках и моделирующих взаимодействие разрывов под произвольными углами.
2. Создание уравнений состояния веществ, не содержащих эмпирических констант.
3. Настройка вычислительных алгоритмов на особенности УРС: пересечение ударных адиабат и изэнтроп с границами фаз, расщепление ударных волн и волн разрежения, образование и распространение ударных волн разрежения.
4. Создание кинетических уравнений для моделирования фазовых переходов, химических реакций в ВВ, развития поврежденности кристаллической структуры материалов.
5. Создание уравнений, моделирующих взаимодействия компонентов смеси при различных комбинациях агрегатных состояний.

**Смесь не имеет уравнения состояния!
Каждый компонент смеси имеет свой УРС!**

Заключение

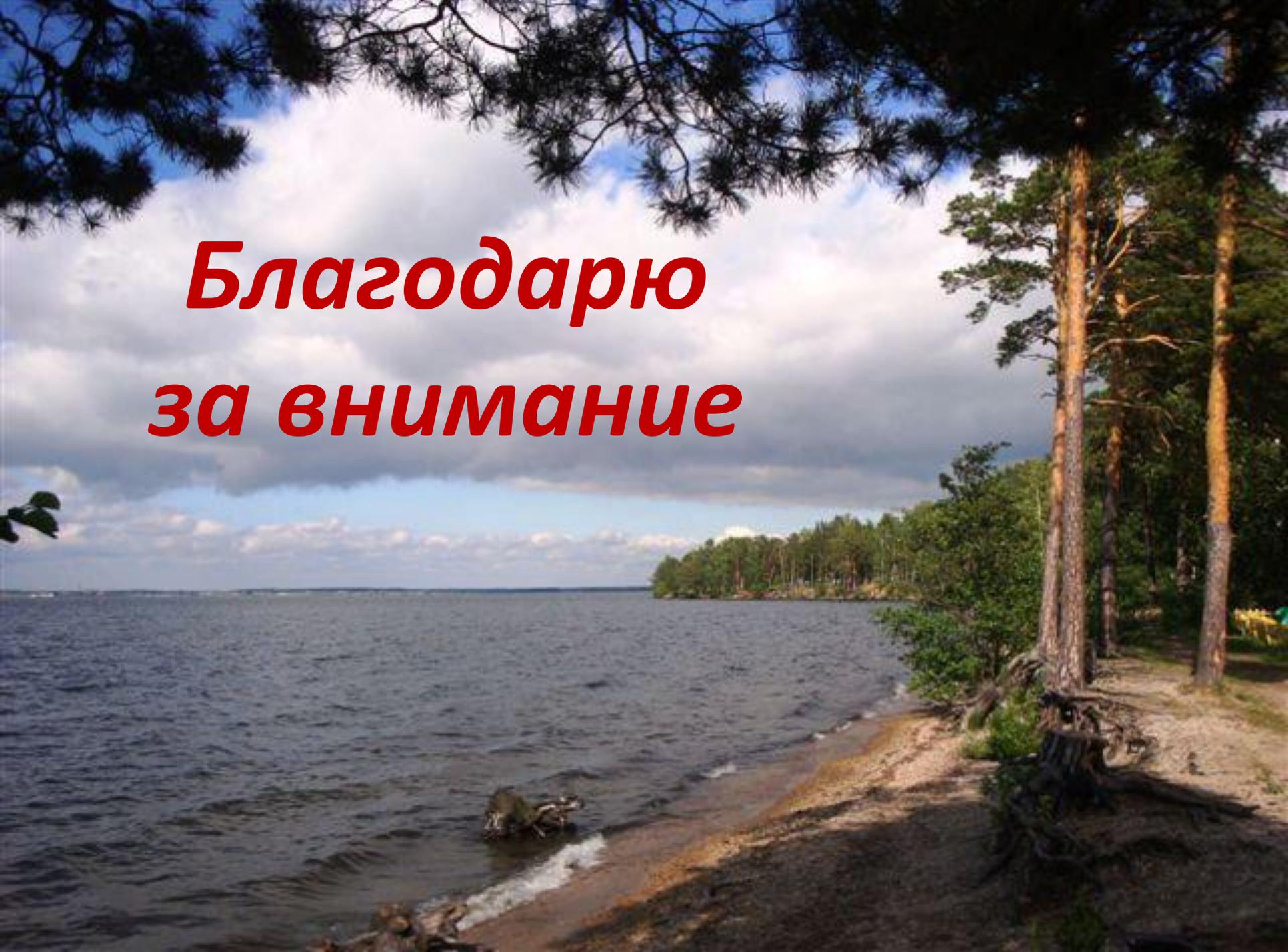
Гипотеза о непрерывности сплошной среды дала возможность записать законы сохранения в виде дифференциальных уравнений в частных производных и создать механику сплошной среды, а затем и вычислительную механику сплошной среды.

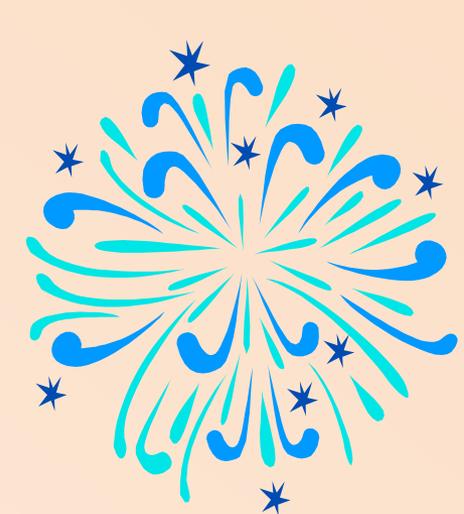
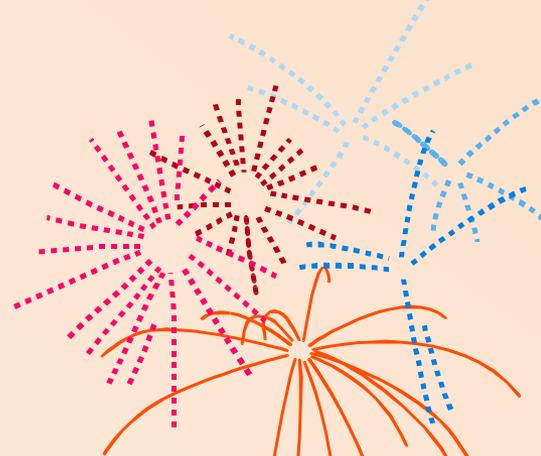
Модели МСС с эмпирическими параметрами были эффективно использованы при создании кораблей, самолетов, ракет, при разработке технологических процессов во многих отраслях промышленности.

Модель сплошной среды верно служит людям больше 200 лет.

- **Сегодняшние возможности ЭВМ позволяют начать создание моделей нового поколения без эмпирических параметров.**
- **Жизнь заставляет нас не описывать эксперимент, а прогнозировать результат.**

***Благодарю
за внимание***





***Поздравляю
Владимира
Михайловича
с юбилеем!!!***

