

2002

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

МОСКВА

УДК 541.12.03

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКЛИКА ВЕЩЕСТВ НА ДИНАМИЧЕСКОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ*

© 2002 г. В. Ф. Куропатенко

Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики, Снежинск

Поступила в редакцию 20.12.2000

Модели динамических процессов в сплошной среде предполагают наличие и распространение сильных, слабых и контактных разрывов, а также поверхностей фазовых переходов, перемежающихся областями непрерывного изменения параметров среды. В случае простых уравнений состояния (УРС) отклик вещества на динамические нагрузки изучен достаточно хорошо. Более сложные УРС, описывающие фазовые переходы, заметно усложняют проблему. Наличие изломов изэнтроп и изотерм на границах равновесных фаз приводит к расщеплению сильных разрывов и появлению ударных волн разрежения, на фронте которых энтропия возрастает, а давление и плотность уменьшаются. Исследование этих явлений проводится с помощью модели, в которой выделяется адабатическое ядро, а все процессы тензорного характера записываются в виде уравнений, дополняющих законы сохранения для идеальной среды. Рассмотрены примеры расщепления ударной волны и волны разрежения.

ВВЕДЕНИЕ

Динамические процессы возникают, как правило, при кратковременных импульсных механических, тепловых, электромагнитных или других воздействиях на сплошную среду (вещество). Динамические воздействия порождают в веществе сильные, слабые и контактные разрывы. В реальных веществах изменение термодинамических характеристик в широком диапазоне сопровождается фазовыми переходами (плавление, испарение, полиморфизм), ионизацией, диссоциацией, разрушением и потерей сплошности, химическими реакциями. Эти физические особенности веществ приводят к появлению фазовых разрывов, на поверхности которых скачком изменяются теплопроводность, скорость звука и другие вторые производные термодинамических потенциалов, либо испытывают скачки первые производные термодинамических потенциалов. Скорость распространения фазовых разрывов определяется эволюционным изменением величин в окрестности разрыва и может изменяться от нуля до бесконечности.

Математическое моделирование перечисленных выше особенностей возможно лишь с помощью сложных математических моделей. В ряде таких моделей выделяется адабатическое ядро, включающее законы сохранения идеальной среды и уравнение состояния. Все процессы тензорного характера определяются девиаторами тензоров напряжений, деформаций и скоростей деформации (вязкость, упругость, пластичность) и др. Неравновесные процессы, связанные с перестройкой структуры вещества, описываются кинетическими уравнениями. Все эти уравнения до-

полняют адабатическое ядро модели. Такая структура моделей сплошных сред позволяет непрерывно переходить из области, где существенную роль играют напряжения и деформации сдвига, в область идеальной жидкости, где они несущественны.

1. ДИНАМИЧЕСКИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ

Если время τ воздействия на вещество намного меньше времени t распространения акустического сигнала по веществу, имеющему характерный размер L ,

$$\tau \ll t = L/a,$$

где a – скорость звука, то такое воздействие будем называть динамическим.

Динамическими называются процессы, время протекания которых в веществе много меньше указанного выше времени τ . Одним из распространенных видов динамических воздействий является удар. К этому виду воздействий можно отнести падение на Землю космических тел, столкновения метеоритов с космическими объектами, столкновения искусственно ускоренных тел (ударников) с препятствиями. В процессе удара кинетическая энергия ударника превращается во внутреннюю энергию. Распространенным видом динамического воздействия является взрыв ВВ. При этом в веществе возникают ряд динамических процессов (детонационная волна, ударная волна, химическая реакция разложения и т.д.). Еще одним видом динамического воздействия является взаимодействие различных видов излучений с веществом

(световое, рентгеновское, сверхвысокочастотное и другие), воздействие на вещество пучков частиц (электроны, протоны, нейтроны и др.), взаимодействие вещества с электромагнитными полями (электровзрывы проводников). При всех таких воздействиях порождаются динамические процессы, адекватное описание которых возможно только с помощью сложных математических моделей.

2. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ И ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ УРАВНЕНИЯ

Поведение сплошной среды определяет систему законов сохранения массы, количества движения и энергии:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{U} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \operatorname{grad} P - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial S_i}{\partial x_i} = \mathbf{F}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \operatorname{div}((\rho \varepsilon + P)\mathbf{U} - \mathbf{q}) - \\ - \sum_{i,k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i}(S_{ik} U_{ik}) = Q, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\varepsilon = E + 0.5U^2$, $S_i = \sum_{k=1}^3 S_{ik} e_k$, S_{ik} – компоненты девиатора тензора напряжений, \mathbf{q} – поток тепловой энергии. Конкретный вид \mathbf{F} и Q описывает взаимодействие вещества с полями (тяготения, электромагнитным и др.).

Система (1)–(3) при $\mathbf{F} = 0$, $Q = 0$ содержит 5 скалярных уравнений и 18 функций: P , ρ , E , U_i , q_i , S_{ik} . Для замыкания нужно еще 13 независимых уравнений. Уравнения, описывающие свойства сплошной среды (упругость, пластичность, вязкость, теплопроводность и др.), называются определяющими.

Одно из определяющих уравнений – это зависимость теплового потока от $\operatorname{grad} T$, имеющая в простых случаях вид

$$\mathbf{q} = \theta \operatorname{grad} T, \quad (4)$$

где θ – коэффициент теплопроводности, T – температура.

Девять уравнений, связывающих компоненты девиатора тензора напряжений S_{ik} с другими величинами, входящими в (1)–(3), дают модели неидеальных сред (упругих, пластических, хрупких,

вязких и т.д.). Например, для вязкой среды девять уравнений для S_{ik} имеют вид

$$\begin{aligned} S_{ik} = v(\rho, T) \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \right) + \\ + \left[\eta(\rho, T) - \frac{2}{3} v(\rho, T) \right] \delta_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, после формулировки определяющих уравнений типа (4), (5) остается определить два уравнения. В системе термодинамических функций две являются независимыми. В (1)–(4) входят P , ρ , E , T . Пусть независимы ρ , E . Тогда недостающие уравнения должны иметь вид

$$P = P(\rho, E), \quad T = T(\rho, E).$$

Они называются **уравнениями состояния (УРС)**. Построение УРС, описывающих равновесные состояния газа, жидкости, плазмы и твердого тела, – фундаментальная задача. Уравнение состояния должно быть известно для любой фазы, агрегатного состояния, физической или математической модели.

3. СТРУКТУРА УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ

Чаще всего предполагается, что внутренняя энергия и давление расщепляются на холодную и тепловую компоненты:

$$E = E_x(V) + E_t, \quad P = P_x(V) + P_t.$$

Анализ сил притяжения и отталкивания, многочисленные попытки теоретического обоснования формы $E_x(V)$ и $P_x(V)$ и численных значений параметров показывает, что аналитическая форма неустойчива относительно квантовомеханических предположений о свойствах вещества и численные значения теоретических зависимостей $E_x(V)$, $P_x(V)$ необходимо уточнять с помощью физических экспериментов.

Глобальные УРС должны удовлетворять условиям

$$\begin{cases} P_x = 0, \quad E_x = 0, \quad \frac{dP_x}{d\delta} = \rho_{0k} C_{0k}^2 \text{ при } \delta = 1, \\ P_x = 0, \quad E_x = Q_0 \text{ при } \delta = 0, \\ P_x = \infty, \quad E_x = \infty \text{ при } \delta = \infty. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь ρ_{0k} – кристаллическая плотность при $T = 0$, $P = 0$,

$$C_{0k} = \lim_{T, P \rightarrow 0} \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S}, \quad Q_0 = - \int_{V_{0k}}^{\infty} P_x(V) dV. \quad (7)$$

Анализ показывает, что большинство известных зависимостей $E_x(\delta)$ применимо в ограничен-

ной области изменения δ . Ниже приводятся уравнения $P_x(V)$, $E_x(V)$ из [1], удовлетворяющие условиям (6), (7) и позволяющие с высокой точностью описывать сжатие холодных материалов в широком диапазоне плотностей и давлений:

$$E_x = \frac{C_{0k}^2}{(1-\eta)^{f(\eta)}} \left(\sum_{i=1}^3 a_i \eta^i + a_4 \ln(1-\eta) + \frac{a_5 \eta}{1-\eta} \right),$$

$$\begin{aligned} P_x = & \rho_{0k} E_x(\eta) \left[\frac{f(\eta)}{1-\eta} - \frac{df}{d\eta} \ln(1-\eta) \right] + \\ & + \frac{\rho_{0k} C_{0k}^2}{(1-\eta)^{f(\eta)}} \left[\sum_{i=1}^3 i a_i \eta^{i-1} - \frac{a_4}{1-\eta} + \frac{a_5}{(1-\eta)^2} \right], \end{aligned}$$

где

$$f(\eta) = \Gamma_0 + b_1 \eta + b_2 \eta^2 + b_3 \eta^3,$$

$$\eta = 1 - \frac{V}{V_{0k}}, \quad 0 \leq \eta \leq 1.$$

Для описания испарения и конденсации применяются более простые зависимости $E_x(\delta)$, $P_x(\delta)$

$$\begin{aligned} E_x = & \frac{C_{0k}^2}{(m-n)(n-1)(m-1)} \times \\ & \times [(n-1)(\delta^{m-1} - 1) - (m-1)(\delta^{n-1} - 1)], \quad (8) \\ P_x = & \frac{\rho_{0k} C_{0k}^2}{m-n} (\delta^m - \delta^n), \end{aligned}$$

где

$$\delta = \frac{V_{0k}}{V}, \quad 0 \leq \delta \leq 1, \quad Q_0 = \frac{C_{0k}^2}{(m-1)(n-1)}.$$

Тепловая энергия и тепловое давление разделяются на ядерную и электронную компоненты:

$$E_t = E_{t,y} + E_{t,e}, \quad P_t = P_{t,y} + P_{t,e}. \quad (9)$$

Подставив E_t , P_t в уравнение термодинамической совместности, получим

$$\left(\frac{\partial P_t}{\partial T} \right)_V - \frac{P_t}{T} = \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial E_{t,y}}{\partial V} \right)_T + \left(\frac{\partial E_{t,e}}{\partial V} \right)_T \right]. \quad (10)$$

При постоянном V выражение (10) является линейным дифференциальным уравнением, решение которого имеет вид

$$P_t = \psi(V)T + T \int \frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial E_{t,y}}{\partial V} + \frac{\partial E_{t,e}}{\partial V} \right)_T dT. \quad (11)$$

Поскольку $\psi(V)$ является произвольной функцией, обязанной своим происхождением правилам интегрирования, то ее в общем случае можно предста-

вить в виде $\psi(V) = \psi_y(V) + \psi_e(V)$. Тогда уравнение (11) разделяется по компонентам:

$$\begin{cases} P_{t,y} = \psi_y(V)T + T \int \frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial E_{t,y}}{\partial V} \right)_T dT, \\ P_{t,e} = \psi_e(V)T + T \int \frac{1}{T^2} \left(\frac{\partial E_{t,e}}{\partial V} \right)_T dT. \end{cases} \quad (12)$$

В классе уравнений состояния, определяемым гипотезой (9), уравнения (12) являются определениями ядерной и электронной компонент давления.

Выбор зависимости $E_{t,y}(V, T)$ и $E_{t,e}(V, T)$ играет существенную роль в определении области применимости уравнения состояния. Для электронной энергии наиболее часто применяется уравнение с разделяющимися переменными

$$E_{t,e} = f(V)F(T).$$

Из условий согласования функций $\psi(V)$, $f(V)$, $F(T)$ получаем выражение для ψ_e и F :

$$\psi_e(V) = -K_1 \frac{df(V)}{dV},$$

$$F(T) = T^2 \frac{d(K_1 + M(T))}{dT},$$

где $K_1 = \text{const}$. Окончательно уравнения для электронного давления и энергии принимают вид

$$P_{t,e} = \frac{df_e(V)}{dV} TM(T),$$

$$E_{t,e} = f_e(V) T^2 \frac{dM(T)}{dT}.$$

Для определения функций $f(V)$ и $M(T)$ привлекаются как теоретические модели, так и экспериментальные данные.

Если для тепловой энергии ядер принять уравнение

$$E_{t,y} = \frac{3RT^2}{b(V) + T},$$

которое удовлетворительно согласуется с уравнением $E(T)$, следующим из теории Дебая, а для функции Грюнайзена ядер воспользоваться результатами теории Слейтера–Ландау, то условия согласования $\psi_y(V)$ и $b(V)$ приводят к уравнениям

$$\psi_y(V) = -3R \frac{d \ln b(V)}{dV},$$

$$P_{t,y}(V) = -3R \frac{d \ln b(V)}{dV} \frac{T^2}{b(V) + T},$$

где

$$b(V) = \frac{\gamma_0 C_{0k}}{R} V^{(1-\alpha/2)} \left[\frac{d}{dV} (P_x V^\alpha) \right]^{1/2}.$$

4. ИСПАРЕНИЕ

Для построения границы области смеси жидкости и пара рассмотрим теоретические изотермы

$$P = P(V, E(V, T)). \quad (13)$$

Анализ этих изотерм показывает, что на них есть точки, в которых выполняется условие

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = 0. \quad (14)$$

Линия, на которой лежат эти точки, называется, спинодаль. Она определяется уравнениями $V(T)$ и $P(T)$ и ограничивает область неустойчивости равновесных состояний вещества $V_A(T) \leq V \leq V_B(T)$, в которой $(\partial P / \partial V)_T > 0$. “Немонотонный” ход изотерм определяется соответствующим выбором $P_x(\delta)$. В [2] эта зависимость имеет вид (8). Чтобы определить уравнение спинодали, продифференцируем (13) по V при $T = \text{const}$:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_E + \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_V \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T. \quad (15)$$

Уравнения (13)–(15) позволяют найти $V_A(T)$ и $V_B(T)$.

Для нахождения границы равновесной смеси фаз используется уравнение Максвелла

$$P_p(V_r - V_\infty) - \int_{V_\infty}^{V_r} P(V, E(V, T)) dV = 0, \quad (16)$$

где $V_r(T)$ – удельный объем на границе смеси и газа, $V_\infty(T)$ – удельный объем на границе смеси и жидкости. Эти величины находятся из уравнения (13) при $P = P_p = \text{const}$. После нахождения $V_r(T)$ и $V_\infty(T)$ из уравнения (13) находятся $P_r(T)$, $E_r(T)$ и $P_\infty(T)$, $E_\infty(T)$. Поскольку, как правило, все рассмотренные уравнения нелинейны, бинодаль табулируется. Таблица

$$P_k, \quad T_k, \quad E_{rk}, \quad V_{rk}, \quad E_{\infty k}, \quad V_{\infty k},$$

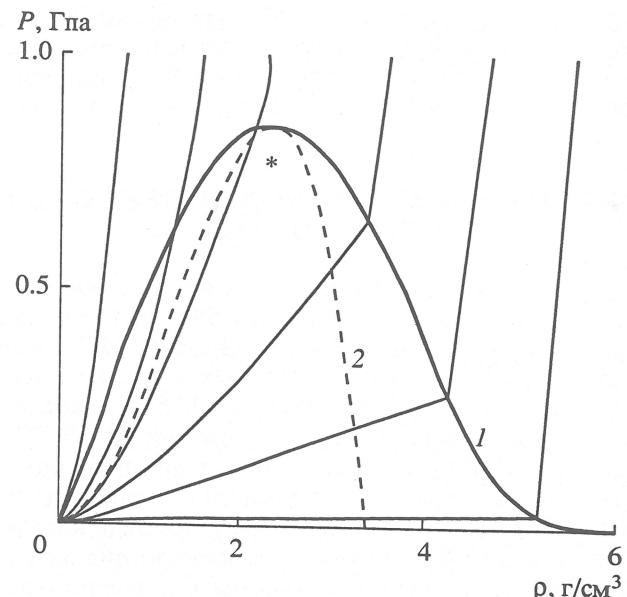


Рис. 1.

где k – номер узла, используется затем для нахождения P и T по заданным V и E в области смеси. Для этой цели решается уравнение

$$H(P) = [E - E_\infty(P)][V_r(P) - V_\infty(P)] - [V - V_\infty(P)][E_r(P) - E_\infty(P)] = 0,$$

где $V_\infty(P)$, $V_r(P)$, $E_\infty(P)$, $E_r(P)$ определяются интерполяцией вдоль бинодали (16). Температура находится после нахождения P из линии равновесия $T_k(P_k)$.

На рис. 1 изображена область смеси жидкость–пар для меди, полученная для УРС [3]. Здесь 1 – бинодаль (граница области двухфазных состояний), 2 – спинодаль, * – критическая точка из [4]. Сплошными линиями изображены изэнтропы. Видно, что критическая точка в УРС [3] отличается от критической точки из [4] на ~15%. В настоящее время такая точность является недовлетворительной.

В таблице приведены значения плотности и давления в критической точке и теплоты сублимации для УРС [5] и их сравнение с эксперимен-

Таблица

| Вещество | $\rho_{\text{крит}}, \text{г/см}^3$ | | $P_{\text{крит}}, \text{ГПа}$ | | $Q_0, \text{кДж/г}$ | |
|----------|-------------------------------------|------|-------------------------------|------|---------------------|------|
| | a | b | a | b | a | b |
| Al | 0.93 | 0.64 | 1.1 | 0.45 | 10.4 | 10.5 |
| Pb | 2.77 | 3.55 | 0.21 | 0.20 | 0.82 | 0.86 |
| Cu | 2.37 | 2.40 | 0.84 | 0.75 | 4.46 | 5.80 |

Примечание: a – УРС [5], b – эксперимент [4].

тальными данными из [4]. Из сравнения видно, что для алюминия погрешность определения критической плотности достигает ~30%, а погрешность определения критического давления ~50%.

5. ПОЛИМОРФНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ГОРНЫХ ПОРОДАХ

Свойства многих силикатных пород с большими массовыми концентрациями SiO_2 качественно похожи на свойства кварца – одного из основных оксидов, входящих в состав горных пород. Его массовая концентрация в гранитах ≈0.75, в диабазах ≈0.5, в песчаниках ≈0.9. При давлении 10–50 ГПа силикатные породы испытывают полиморфные фазовые переходы из α -кварца в плотные модификации коэсит и стишовит. На ударной адиабате в этом диапазоне давлений отчетливо видны изломы, соответствующие границам области полиморфного фазового перехода. Этот переход происходит неравновесно, и состояния SiO_2 не лежат в области смеси на линии фазового равновесия $F(P, T) = 0$. Описание неравновесных фазовых переходов выходит за рамки УРС, которые, как было сказано выше, описывают лишь равновесные состояния и требуют создания математических моделей, включающих кинетические уравнения. Однако для не очень точных расчетов созданы модели, в которых этот фазовый переход рассматривается как равновесный или квазиравновесный. В таком случае можно обойтись построением соответствующего УРС.

В [6] построено УРС, в котором фазовый переход из α -кварца в стишовит является равновесным. Уравнение состояния плотной и рыхлой фаз берется в виде

$$P_i = \frac{\rho_{0ki} C_{0ki}^2}{n_i} (\delta_i^{n_i} - 1) + \Gamma_i C_{V_i} \rho_i T_i, \quad (17)$$

$$E_i = \frac{C_{0ki}^2}{n_i} \left(\frac{\delta_i^{n_{i-1}} - n_i}{n_i - 1} + \frac{1}{\delta_i} \right) + E_{0i} + C_{V_i} T_i, \quad (18)$$

где $C_{V_i} = \text{const}$, $\Gamma_i = \text{const}$, $E_{0i} = \text{const}$, $i = 1, 2$ – номер фазы. Область равновесной смеси определяется уравнениями

$$\begin{aligned} P_1 &= P_2 = P, \quad T_1 = T_2 = T, \\ E_1 + PV_1 - TS_1 &= E_2 + PV_2 - TS_2. \end{aligned} \quad (19)$$

Энтропия S_i выражается из (17), (18) и имеет вид

$$S_i = C_{V_i} \ln(TV_i^{\Gamma_i}) + S_{0i}. \quad (20)$$

Значения E_1, E_2 из (18) и S_1, S_2 из (20) подставим в (19). В результате получим уравнение

$$\begin{aligned} &\frac{C_{0ki}^2}{n_i} \left(\frac{\delta_i^{n_i} - n_i}{n_i - 1} + \frac{1}{\delta_i} \right) - \frac{C_{0k2}^2}{n_2} \left(\frac{\delta_2^{n_2} - n_2}{n_2 - 1} + \frac{1}{\delta_2} \right) + \\ &+ T \{ C_{V_1} [1 - \ln(TV_1^{\Gamma_1})] - C_{V_2} [1 - \ln(TV_2^{\Gamma_2})] \} + \\ &+ P(V_1 - V_2) + E_{01} - E_{02} + T(S_{01} - S_{02}) = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Исключив в (21) ρ_1 и ρ_2 с помощью (17), получим уравнение линии фазового равновесия:

$$P = F(T) \text{ или } T = T(P). \quad (22)$$

Границы фаз

$$\delta_{\Gamma_i} = f_i(P), \quad E_{\Gamma_i} = \phi_i(P) \quad (23)$$

находятся из (17), (18) и (22). В области смеси P находится по ρ, E из (23) и уравнения

$$\frac{E - E_{r1}(P)}{E_{r2}(P) - E_{r1}(P)} = \frac{V - V_{r1}(P)}{V_{r2}(P) - V_{r1}(P)},$$

которое решается численно. При использовании этого УРС в расчетах возникают ударные волны разрежения и происходит расщепление ударной волны сжатия, что надежно не подтверждается экспериментально. Кроме того, равновесность фазового перехода не допускает существование стишовита при нормальных условиях, что тоже противоречит опытным данным.

В [7] предложено уравнение состояния кварца, в котором фазовый переход при нагрузке происходит равновесно, а при разгрузке не происходит совсем. Уравнение состояния рыхлой фазы имеет вид

$$P = \Gamma_i \rho [E - E_{H_i}(V)] + P_{H_i}(V), \quad (24)$$

$$P_{H_i} = 1/n(\delta^n - 1). \quad (25)$$

В уравнении состояния стишовита зависимость давления P_H от плотности на ударной адиабате имеет вид, отличный от (25):

$$P_{H_2} = \left(\frac{C_{0k2}}{C_{0k1}} \right)^2 \frac{1}{\{1 - \lambda[(\delta - 1)/\delta]\}^2}.$$

Зависимость $\Gamma(\delta)$ имеет вид

$$\Gamma = \Gamma_\infty + (\Gamma_0 - \Gamma_\infty) \left(\frac{\delta_{0k2}}{\delta} \right)^2.$$

При разгрузке из области смеси предполагается, что массовые концентрации плотной и рыхлой фаз остаются постоянными вдоль адиабат. В этом случае P находится из уравнения (24).

Следует обратить внимание на то, что при разгрузке сохраняется массовая концентрация, что

является описанием процесса, так как ζ изменяется при переходе от одной частицы к другой:

$$\zeta = \frac{V - V_{r1}(P)}{V_{r2}(P) - V_{r1}(P)} = \text{const.}$$

Такое описание выходит за рамки УРС, описывающих только равновесные состояния вещества. Поэтому в [7] предложено не УРС, а способ описания поведения кварца в области фазового перехода.

6. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПРОДУКТОВ ВЗРЫВА

В течение многих лет предпринимаются попытки построения сложных и более точных УРС продуктов детонации (ПД). В [8] предложено уравнение состояния ПД гексогена, а в [9] – уравнение состояния ПД целой группы плотных взрывчатых веществ (ВВ).

Рассмотрим УРС ПД из [10], в котором для определения численных значений параметров используются зависимости от начальной плотности ВВ скорости нормальной детонации $D(\rho_0)$, массовой скорости на фронте детонационной волны $U(\rho_0)$ и калорийности $Q(\rho_0)$.

Зависимость P от ρ, E берется в виде

$$P = [\gamma(\rho) - 1]\rho E + \phi(\rho). \quad (26)$$

Для нахождения функций $\gamma(\rho)$ и $\phi(\rho)$ строится уравнение линии точек Жуге, соответствующих различным значениям ρ_0 . Эта линия определяется уравнением (26) и уравнениями на сильном разрыве. Проводится анализ зависимостей $D(\rho_0)$, $U(\rho_0)$, $Q(\rho_0)$, строятся численные зависимости $\gamma(\rho_0)$ и $\phi(\rho_0)$ и затем делается переход от ρ_0 к ρ . В результате получаются выражения

$$\gamma = \begin{cases} \gamma_0 + (\gamma_\infty - \gamma_0)x(3 - 3x - x^2) & \text{при } x \leq 1, \\ \gamma_\infty & \text{при } x > 1, \end{cases} \quad (27)$$

где $x = \delta/\delta_*$;

$$\Phi = \begin{cases} \rho_0 D_k^2 A (x-1)^m & \text{при } x > 1, \\ 0 & \text{при } x \leq 1. \end{cases} \quad (28)$$

Численные значения A, m, δ_* выбираются так, чтобы наилучшим образом описывались экспериментальные зависимости: $D(\rho_0)$, $U(\rho_0)$, $Q(\rho_0)$. Зависимости (27), (28) записаны в безразмерной форме. Для широкого круга ВВ значения A, m, δ_* таковы: $m = 2.284$, $A = 0.0139$, $\gamma_0 = 1.375$, $\gamma_\infty = 1.67$, $\delta_* = 0.36$.

В [10] для нескольких ПД предлагаются конкретные значения ρ_{0k}, D_k , которые позволяют перейти от безразмерных функций к размерным.

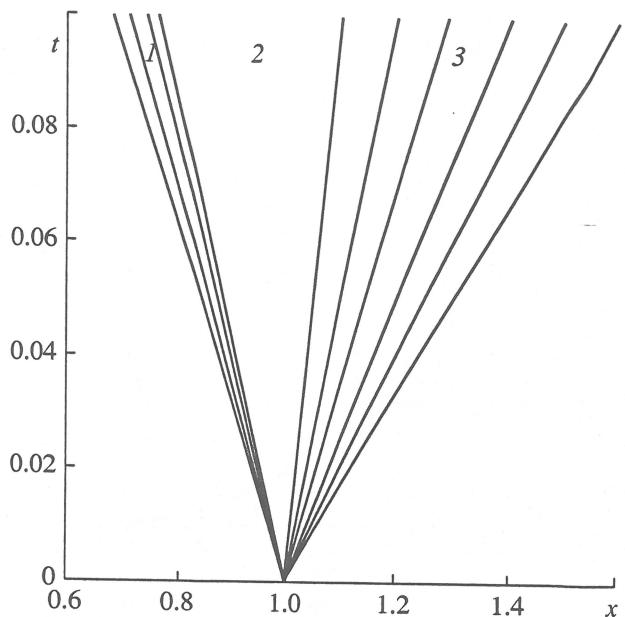


Рис. 2.

7. РАСЩЕПЛЕНИЕ ВОЛНЫ РАЗРЕЖЕНИЯ НА ИСПАРЕНИИ

При расчете течений с фазовыми переходами возникают особые слабые разрывы, которые одновременно являются границей фазовых состояний. В этом случае термодинамические величины и скорость остаются непрерывными при переходе через поверхность слабого разрыва, а скорость звука скачком меняется. При выполнении условия

$$W(a_{x+0} - a_{x-0}) > 0 \quad (29)$$

слабый разрыв расщепляется на два слабых разрыва. Вперед распространяется слабый разрыв со скоростью W , равной наибольшему из значений a_{x+0}, a_{x-0} , следом за ним распространяется слабый разрыв со скоростью W , равной наименьшему из значений a_{x+0}, a_{x-0} . При условии $W(a_{x+0} - a_{x-0}) < 0$ возникает сильный разрыв.

Ниже рассмотрена структура волны разрежения в железе, которое в начальный момент времени $t = 0$ находится в области $0 \leq x \leq 1$ в состоянии с безразмерными параметрами: $P = 3.67$, $\rho = 4$, $E = 6$, $U = 0$ из [3]. Для перехода к безразмерным величинам использовались значения $\rho_{0k} = 8 \text{ г}/\text{см}^3$ и $C_{0k} = 4 \text{ км}/\text{с}$. Уравнение состояния железа взято из [3]. На границе $x_0 = 1$ задано краевое условие $P = 0$. Такой разрыв при $t = 0$ является неустойчивым. После распада разрыва образуется четыре слабых разрыва:

- 1) $D = -3.19, P = 3.67, \rho = 4.0, E = 6.0, U = 0;$
- 2) $D = -2.46, P = 0.975, \rho = 3.69, E = 5.95, U = 0.283;$

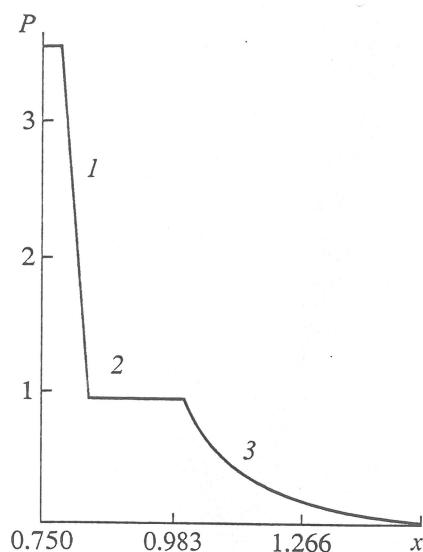


Рис. 3.

$$3) D = -0.0924, \quad P = 0.975, \quad \rho = 3.69, \\ E = 5.95, \quad U = 0.283;$$

$$4) D = 6.30, \quad P = 0, \quad \rho = 0, \quad E = 0.71, \quad U = 6.30.$$

На рис. 2 приведены две центрированных волны разрежения. Волна разрежения 1 в жидким железе характеризуется быстрым падением давления с ростом x . Волна разрежения 3 в испаренном железе характеризуется медленным спаданием давления. Между волнами разрежения находится область постоянного течения 2. На рис. 3 приведена зависимость $P(x)$ на момент $t = 0.0692$, полученная при расчетах с помощью неоднородного численного метода ВОЛНА [11].

Существует также второй тип неустойчивости волны разрежения. Если луч, соединяющий любые две точки в теле волны разрежения, лежит не ниже изэнтропы, то волна разрежения устойчива. В противном случае волна становится неустойчивой и в ее теле возникает ударная волна разрежения.

Изложенная математическая модель была применена для расчета ударных волн и волн разрежения в двухфазном веществе. Уравнение состояния вещества, в котором рассчитывается взрыв, было взято из [6]. На рис. 4 приведены ударная адиабата, изэнтропа и линии фазовых переходов второго рода в веществе с фазовым переходом из фазы, по своим параметрам близкой к кварцу, в фазу, адекватную стишовиту. Индексом "1" обозначены параметры рыхлой фазы (кварц), индексом "2" – плотной фазы (стишовит).

При $t = 0$ в кварце задавались $P = 0, \rho = \rho_{01}, E = 0, U = 0$. В центре системы задавалась сферическая полость, заполненная разогретым газом.

На рис. 5 в безразмерных переменных $\bar{r} = r/r_g$, $\bar{t} = C_{01}t/r_g$, где $r_g = (Q/\rho_{01}C_{01}^2)^{1/3}$, Q – начальная энер-

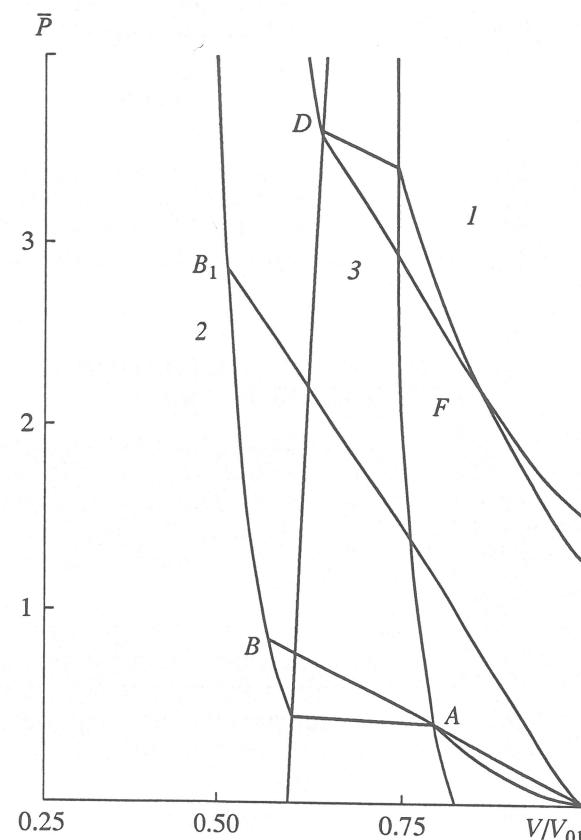


Рис. 4.

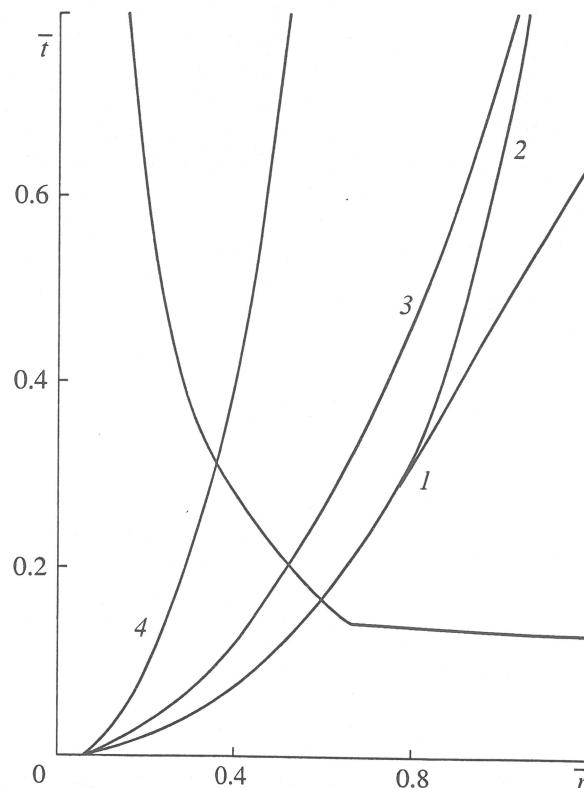


Рис. 5.

гия газа, изображена траектория границы продуктов взрыва 4 и траектория ударной волны разрежения 3.

На первой стадии взрыва по веществу распространяется устойчивая ударная волна, за которой следует волна разрежения. В некотором месте волны разрежения образуется скачок разрежения с состоянием перед фронтом, соответствующим точке D на рис. 4. Давление за этим скачком с течением времени падает. В этом случае условие устойчивости скачка требует, чтобы параметры за его фронтом соответствовали бы точке F (рис. 4). Таким образом, α -характеристики, выходящие с границы полости, не догоняют скачок разрежения, поскольку он движется относительно вещества со скоростью звука. В то же время сам скачок разрежения является источником α -характеристик, догоняющих фронт ударной волны сжатия. Именно это является определяющим фактором, влияющим на профили всех величин между пузырьком и ударной волной.

8. РАСЩЕПЛЕНИЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Рассмотрим пример, связанный с распространением ударных волн в двухфазной среде кварц-стишовит. Если луч, соединяющий исходное состояние вещества ($P = 0$, $\eta = V/V_0 = 1$) с некоторой, лежащей на ударной адиабате, точкой B_1 , всюду в промежутке $(\eta_B, 1)$ лежит выше ударной адиабаты, то ударная волна оказывается устойчивой. Граница устойчивых сильных разрывов, по обе стороны которых вещество находится в рыхлой и плотной фазах, определяется лучом, который в одной точке касается ударной адиабаты. На рис. 4 такой луч соединяет точки с координатами $\eta = 1$ и $\eta = \eta_B$ и проходит через точку A. В точке B давление равно P_B . При уменьшении амплитуды такой ударной волны она расщепляется на две. За фронтом первой ударной волны $P = P_A$, $\eta = \eta_A$,

$$U_A = [P_A(1 - \eta_A)V_0]^{1/2},$$

$$D_A = \left(\frac{P_A V_0}{1 - \eta_A} \right).$$

Поскольку точка A лежит на границе между рыхлой фазой 1 и смесью фаз 3, то в ней изэнтропа и ударная адиабата претерпевают излом, вследствие которого

$$C_{A3} < C_{A1}.$$

Характеристики 1-го семейства

$$dx/dt = U_A + C_{A3}$$

не догоняют ударную волну, в результате чего ее амплитуда в плоском случае будет оставаться по-

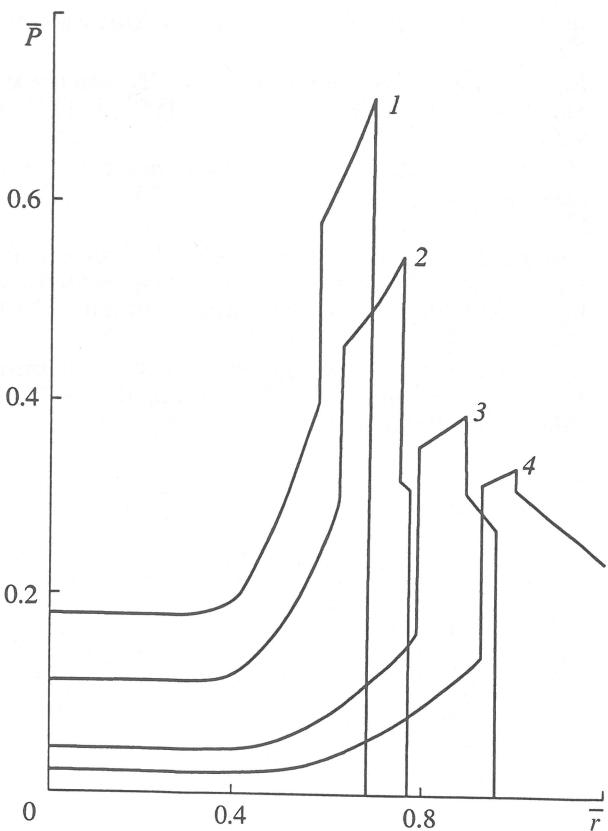


Рис. 6.

стоянной, а в сферическом или цилиндрическом случаях при $W > 0$ будет уменьшаться из-за присутствия в законах сохранения члена $(v - 1)/r$. Массовая скорость ударной волны, состояние перед фронтом которой совпадает с точкой A (P_A , V_A , U_A , E_A), отличается от массовой скорости W_B ударной волны, имеющей то же состояние перед фронтом и давление за фронтом, равное P_B :

$$W^2 = W_B^2 + \frac{\gamma + 1}{2} \rho_A (P - P_B).$$

Ударные волны, у которых $P < P_B$, распространяются по веществу со скоростью меньшей, чем W_B , и, следовательно, отстают от первой ударной волны. На рис. 5 изображены траектории первой и второй ударных волн (1 и 2). На рис. 6 изображены профили давления \bar{P} как функции \bar{r} на различные моменты времени \bar{t} (1 – до расщепления ударной волны, 2–4 – после расщепления).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Куропатенко В.Ф. О точности методов построения уравнений состояния. Препринт № 119. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 1997. С. 14.
2. Куропатенко В.Ф., Нечай В.З., Сапожников А.Т., Севастьянов В.Е. // Докл. на III Всесоюз. сем. по

- моделям механики сплошной среды. Новосибирск, 1973.
3. Куропатенко В.Ф., Минаева И.С. // Численные методы механики сплошной среды. 1982. Т. 13. № 6. С. 69.
 4. Дремин А.Н., Леонтьев А.А., Фортов В.Е. // Теплофизика высоких температур. 1975. Т. 13. № 5. С. 1072.
 5. Сапожников А.Т., Першина А.В. // Вопр. ат. науки и техн. Сер. "Методики и программы численного решения задач математич. физики". 1979. Вып. 4(6). С. 47.
 6. Крупников К.К., Куропатенко В.Ф., Сапожников А.Т., Симанов Б.Н., Симоненко В.А. // Докл. АН СССР. 1972. Т. 202. № 2. С. 300.
 7. Замышляев Б.В., Евтерев Л.С., Кривошеев С.Г. // Докл. АН СССР. 1980. Т. 251. № 2. С. 322.
 8. Кузнецов Н.М., Шведов К.К. // Физика горения и взрыва. 1965. № 4. С. 85.
 9. Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Телегин Г.С. // ЖПМТФ. 1969. № 4. С. 129.
 10. Куропатенко В.Ф. // Численные методы механики сплошных сред. 1977. Т. 8. № 6. С. 68.
 11. Куропатенко В.Ф., Кузнецова В.И., Михайлова Г.И. и др. // Вопр. ат. науки и техн. Сер. "Математическое моделирование физических процессов". 1989. Вып. 2. С. 9.

