

## МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНОГО СЖАТИЯ И ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ СЛОЖНЫХ СОЕДИНЕНИЙ<sup>1</sup>

В.Ф. Куропатенко<sup>2</sup>, С.Ю. Филатов<sup>3</sup>

Предложен способ построения уравнений состояния в области небольших давлений. Основные параметры уравнения состояния подобраны для сложных химических соединений 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

На сегодняшний день в литературе описано большое количество уравнений состояния веществ (УРС) от самых 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. Предлагаемое малопараметрическое УРС существенно сократит время расчета на ЭВМ сложных физических процессов.

### Уравнения на поверхности сильного разрыва

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

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

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

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

Величины без индекса в уравнениях (1)–(3) характеризуют состояние за разрывом,  $D$  – скорость ударной волны. Величины с индексом 0, такие как  $\rho_0$  – 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  $U_0 = 0$ .

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

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

Система, состоящая из трех уравнений (4), (5) содержит пять величин  $P$ ,  $\rho$ ,  $E$ ,  $U$ ,  $D$ . Если любые две из них получены экспериментальным путем, то остальные величины можно найти из

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №13-01-00072.

<sup>2</sup> Куропатенко Валентин Федорович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник ФГУП РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск, Российская Федерация.

<sup>3</sup> Филатов Сергей Юрьевич – научный сотрудник, ФГУП РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск, Российская Федерация.

E-mail: phil@chel.ru

выражений (4) и (5). Точка на ударной адиабате определяется полностью. Зависимость между экспериментально измеренными  $D$  и  $U$  известна уже более пятидесяти лет и удовлетворительно 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 для элементов и соединений.

Давление  $P$  определяется калорическим уравнением состояния (УРС) вида  $P = P(\rho, E)$  в том случае, если  $\rho$  и  $E$  – независимые термодинамические переменные. Сложные и трудоемкие современные УРС рассмотрены в [3, 4], однако для экспресс-расчетов достаточно использовать достаточно 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  $P_X(x)$ ,  $E_X(x)$  и  $P_T(E_T, x)$  следуют из (8) и (9)

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

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

$$P = (\gamma-1)\rho_0 E x^{-1} + \rho_0 C_0^2 \cdot \phi(x), \quad (11)$$

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  $\gamma$  и  $n$ », если  $\gamma = n$ . Таким образом, уравнение (11) примет вид

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

где  $\rho_0$ ,  $C_0$  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  $E$  выразим 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  $n$  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)  $\rho_{0K}$ ,  $C_{0K}$  – 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  $x = x_m$ . 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;  $\mu$  – 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 ( $T = T_{пл}$ ,  $C_P = C_{Pпл}$ ,  $\rho = \rho_{пл}$ ). 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:  $\rho_{0K}$ ,  $C_{0K}$ ,  $A$ ,  $n_0$ ,  $n_m$ ,  $x_m$  и  $\theta_0$ . Численные значения этих параметров определяются таким образом, чтобы наилучшим образом описать поведение ударной адиабаты состояние 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  $P_{пл} = 10^{-4}$  ГПа,  $T_1 = T_{пл}$ ,  $\rho_1 = \rho_{пл}(T_{пл}, P_0)$ ,  $C_{P1} = C_P(T_{пл}, P_0)$ .

### Результаты расчетов

Расчеты выполнены для нескольких сложных химических соединений. 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 справочников [9–12]. В таблице сведены результаты расчетов подбора основных параметров УРС. Указанные в таблице значения  $n_0$  являются подгоночными параметрами и в области, где  $n < 1$  не применяется.

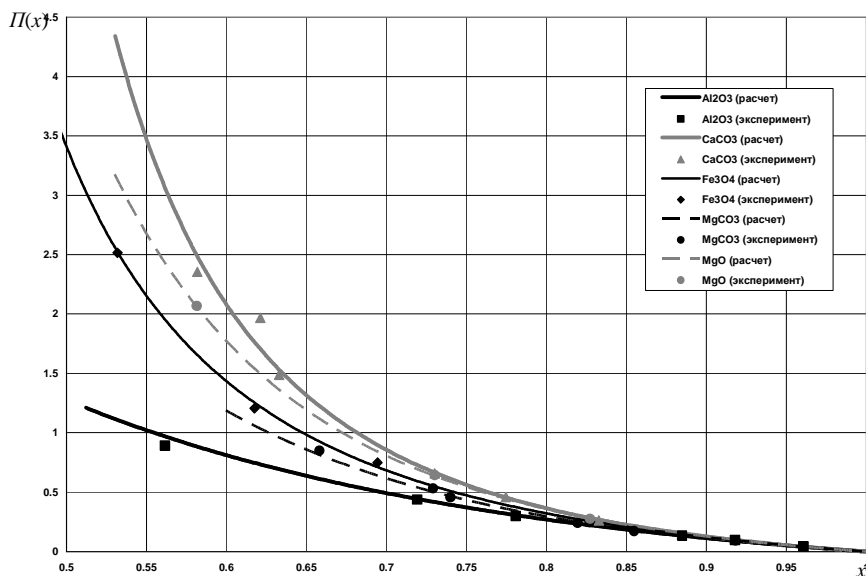


Рис. 1. Сравнение экспериментальных и теоретических зависимостей  $\Pi(x)$  на ударной адиабате

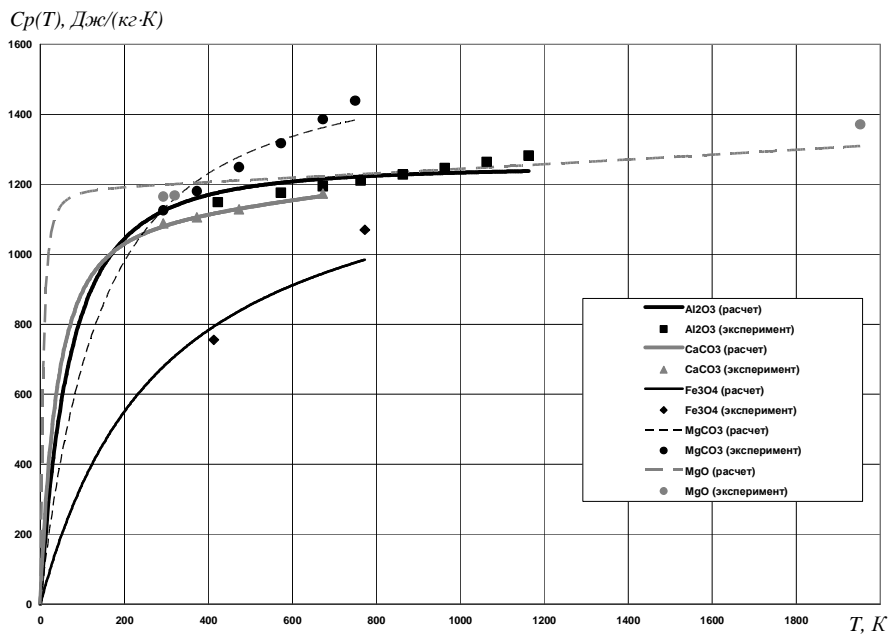


Рис. 2. Сравнение экспериментальных и теоретических зависимостей  $C_p(T)$

Результаты подбора основных параметров уравнения состояния

Величины	Вещества				
	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (корунд)	CaCO <sub>3</sub> (кальцит)	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (магнетит)	MgCO <sub>3</sub> (магнезит)	MgO (периклаз)
$n_0$	0,554	1,1617	0,518	0,897	1,073
$n_m$	1,242	2,375	2,353	2,120	2,220
$x_m$	1,522	0,621	1,041	1,415	0,852
$\rho_{0K}$ , г/см <sup>3</sup>	3,969	2,755	5,294	3,183	3,501
$C_{0K}$ , км/с	8,757	3,813	4,722	6,482	5,972
$A \cdot 10^6$ , кДж/г	1251	1092	1064	1440	1184
$\theta_0$ , К	50,912	33,174	18,762	42,445	4,003

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. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Часть 2. / В.Ф. Куропатенко. – М.: Янус-К, 2008. – серия Б, Том VII. – С. 436–450.
5. Куропатенко, В.Ф. Уравнение состояния продуктов детонации конденсированных ВВ / В.Ф. Куропатенко // Численные методы механики сплошных сред. – 1977. – Т. 8. № 6. – С. 68–71.
6. Куропатенко, В.Ф. Уравнение состояния продуктов детонации плотных ВВ / В.Ф. Куропатенко // ФГВ. – 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. Самсонов, Г.В. Тугоплавкие соединения (Справочник) / Г.В. Самсонов, И.М. Виницкий. – М.: Металлургия, 1969. – 456 с.
10. Кикоин, И.И. Таблицы физических величин. Справочник. / Под. ред. И.И. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.
11. Физико-химические свойства окислов. Справочник. / Под. ред. Самсонова Г.В. – М.: Металлургия, 1969. – 456 с.
12. Рябин, В.А. Термодинамические свойства веществ. Справочник / В.А. Рябин, М.А. Остроумов, Т.Ф. Свит. – Л.: Химия, 1977. – 392 с.

Поступила в редакцию 11 августа 2015 г

## SIMULATION OF SHOCK COMPRESSION AND THERMAL EXPANSION OF COMPLEX COMPOUNDS<sup>1</sup>

V.F. Kuropatenko<sup>2</sup>, S.Yu. Filatov<sup>3</sup>

A new method of the formulation of state equations in the area of not very big pressures is offered. Basic parameters of the state equation are selected for complex chemical compounds using the original version of the Simplex-method.

The method uses linear dependences of the shock wave velocity against the substance velocity and thermal expansion data under constant pressure. For the target function a sum of quadratic differences between calculated and experimental values has been selected. Satisfactory coincidence of theoretical and experimental values is obtained.

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

### References

1. Zababakhin E.I. *Nekotorye voprosy gazodinamiki vzryva* [Some questions of dynamics of gas explosion]. Snezhinsk: RFYaTs-VNIIF Publ., 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* [The experimental data on shock compression and adiabatic expansion of materials]. Sarov, RFYaTs-VNIIEF Publ., 2001. 439 p. (in Russ.).
3. Zharkov V.I., Kalinin V.A. *Uravnenie sostoyaniya tverdykh tel pri vysokikh davleniyakh i temperaturakh* [The equation of the solids state at high pressures and temperatures]. Moscow, Nauka Publ., 1968. 310 p. (in Russ.).
4. Kuropatenko V.F. *Uravnenie sostoyaniya komponentov nizkotemperaturnoy plazmy. Entsiklopediya nizkotemperaturnoy plazmy. Chast' 2.* [The equation of the components state of low-temperature plasma. Encyclopedia of low-temperature plasma. Part 2]. Moscow, Yanus-K Publ., 2008. Series B, Vol. VII. pp. 436–450. (in Russ.).
5. Kuropatenko V.F. *Chislennyye metody mekhaniki sploshnykh sred*, 1977, Vol. 8, no. 6, pp. 68–71. (in Russ.).
6. Kuropatenko V.F. *Fizika gorennya 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: Chelyabinskiiy gosudarstvennyy universitet Publ., 2007. 302 p. (in Russ.).
9. Samsonov G.V., Vinnitskiy I.M. *Tugoplavkie soedineniya (Spravochnik)* [Refractory compounds (Reference)]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1969. 456 p.
10. Kikoin I.I. *Tablitsy fizicheskikh velichin. Spravochnik* [Tables of physical quantities. Guide.]. Moscow, Atomizdat Publ., 1976. 1008 p. (in Russ.).
11. Samsonova G.V. (Ed.) *Fiziko-khimicheskie svoystva okislov. Spravochnik* [Physical-chemical properties of oxides. Guide]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1969. 456 p. (in Russ.).
12. Ryabin V.A., Ostroumov M.A., Svit T.F. *Termodinamicheskie svoystva veshchestv. Spravochnik* [Thermodynamic properties of substances. Guide]. Leningrad, Khimiya Publ., 1977. 392 p. (in Russ.).

*Received August 11, 2015*

<sup>1</sup> The paper was supported by RFBR. Grant 13-01-00072.

<sup>2</sup> Kuropatenko Valentin Fedorovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Chief Scientist Officer, Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russia Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

<sup>3</sup> Filatov Sergey Yurjevich is Scientist Officer, Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russia Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation.

E-mail: phil@chel.ru