

На правах рукописи

Бельхеева Румия Катдусовна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ
ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ
ГРАФИТОСОДЕРЖАЩЕГО ОБРАЗЦА

01.02.05 — механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск — 2007

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Новосибирский государственный университет"

Научный руководитель:

академик РАН,
профессор Фомин Василий Михайлович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор Кинеловский Сергей Анатольевич;
кандидат физико-математических наук
Краус Евгений Иванович.

Ведущая организация:

Объединенный институт высоких
температур РАН, г. Москва

Защита состоится " " _____ 2007 года в " " часов на заседании диссертационного совета Д 003.035.02 по присуждению ученой степени доктора наук в Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск-90, ул. Институтская, 4.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН.

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный гербовой печатью учреждения, просим направлять по адресу: 630090, г. Новосибирск-90, ул. Институтская, 4/1, ИТПМ им. С.А. Христиановича СО РАН, ученому секретарю диссертационного совета Д 003.035.02.

Автореферат разослан " " _____ 2007 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор технических наук

Засышкин И.М.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Большое внимание к моделям, описывающим поведение гетерогенных сред и происходящих в них процессов, вызвано широким распространением подобных сред в окружающем мире и использованием их в человеческой деятельности. Интенсивное развитие механики многофазных сред вызвано важными практическими приложениями в авиационной и ракетной технике, атомной энергетике, турбостроении и т. д. Значительный интерес представляет исследование процессов, происходящих при распространении ударных волн, т.к. после воздействия высоких импульсных давлений меняются свойства веществ, например, происходит упрочнение металлов, образуются новые высокоплотные фазы.

Интерес к превращению графита в алмаз возник еще в 18-м веке, когда опытами ученых Лавуазье, Теннанта и Дэви было установлено, что алмазы и графит содержат чистый углерод. В 20-м веке было проведено большое количество исследований, посвященных получению алмаза из графита при динамическом нагружении: исследованы параметры ударного сжатия для различных типов графита; определены влияние пористости и начальной температуры образцов на критические параметры начала превращения; проводились эксперименты по выяснению механизма превращения. Однако до настоящего времени существует несоответствие между ожидаемыми и наблюдаемыми в экспериментах разных авторов зависимостями давления начала превращения от температуры и начальной пористости. При численном моделировании ударно-волнового нагружения изучался только процесс прямого превращения графита в алмаз, а в качестве кинетических коэффициентов при моделировании прямых фазовых переходов использовались эмпирические данные, полученные для образцов определенной плотности.

Теоретические и экспериментальные исследования, посвященные описанию поведения смесей, проводились разными авторами и представлены в работах М. J. Stefan, Л. Д. Ландау, Л. И. Седова. Х. А. Рахматулиным была разработана теория взаимодействующего и взаимопроникающего движения многофазных сред. В дальнейшем эта модель развивалась Л. С. Лейбензоном, И. Пригожиным, М. А. Био, Я. И. Френкелем, В. Н. Николаевским, Х. А. Ляховым. Наиболее полно движение смесей и эффекты многофазности отражены в монографиях Р. И. Нигматулина, в которых последовательно и систематически изложены теоретические основы механики и теплофизики многофазных сред различной структуры.

Вопросы, связанные с превращением графита в алмаз, рассматривались в работах О.И. Лейпунского, P.S. De Carly, T.S. Jamieson, F.P. Bundy, D.G. Morris, Г.А. Ададунова, А.В. Ананьина, А.Н. Дремина, Г.И. Канеля, М.Ф. Гоголи, А.З. Жука, А.В. Иванова, А.М. Ставера, А.А. Дерibasа, И.В. Ломоносова, В.Е. Фортова, К.В. Хищенко.

Однако, несмотря на обширную библиографию, до сих пор нет исчерпывающего объяснения расхождения теоретически ожидаемых и экспериментально наблюдаемых параметров фазовых превращений, неясным остается различие в давлениях фазового перехода различных сортов графита. Не разработана математическая модель, осуществляющая комплексное исследование, в котором бы изучались как процесс превращения графита в алмаз при нагрузке, так и процесс обратного превращения алмаза в графит, сопровождающий разгрузку.

Цель работы: Разработка комплексной математической модели, описывающей поведение многофазной конденсированной среды с учетом прямого превращения графита в алмаз при нагрузке и обратного превращения алмаза в графит при разгрузке, включающей в себя:

- определение уравнения состояния смеси, учитывающего индивидуальные свойства компонентов и их концентрации;
- учет прямого и обратного фазовых переходов посредством задания уравнений кинетики;
- определение кинетических коэффициентов для образцов графита различной начальной пористости, позволяющих обходиться без эмпирических данных;
- численное моделирование задачи плоского нагружения со столкновением противоположно направленных ударных волн с целью выявления оптимальных параметров нагружения при получении алмаза из графита.

Научная новизна определяется следующими результатами:

- исследованы различные уравнения замыкания модели. Установлено, что применимость этих уравнений определяется пористостью исследуемого материала. Показано, что для пористого вещества в области высоких давлений и температур наилучшим приближением является широко используемое условие равенства давлений фаз;
- предложено уравнение состояния сплошной и пористой смеси конденсированных компонент, которое описывает поведение материала на стадиях нагрузки и разгрузки;
- предложены модели кинетики прямого и обратного превращений, построенные без использования критических параметров начала перехода, полученных экспериментально, и метод определения кинетических констант, позволяющих описать прямые и обратные фазовые превращения;
- в результате численного исследования построенной математической модели определены параметры нагружения, позволяющие получить алмаз с учетом прямого и обратного переходов; найдены условия,

при которых алмаз не получается, вследствие того, что при нагрузке давление было недостаточным для начала прямого превращения, либо при нагружении была достигнута высокая температура.

Достоверность численных результатов обосновывается хорошим согласованием с экспериментами и расчетными данными других авторов и проверкой сходимости решений путем измельчения расчетной сетки.

Научная и практическая ценность предлагаемой модели состоит в том, что построены модели кинетики прямого и обратного фазовых переходов графит \rightleftharpoons алмаз, в которых не используются критические параметры превращения, полученные экспериментально. Предложен способ определения параметров начала и завершения прямых фазовых переходов для образцов графита различной плотности. Определены оптимальные параметры нагружения, позволяющие сохранить высокоплотную фазу при разгрузке, сопровождающейся обратным переходом. Практическая ценность разработанных численных алгоритмов и компьютерных программ заключается в том, что они применимы для исследования влияния различных параметров нагружения на процессы фазовых переходов при динамическом обжатии смеси по схеме двукратного сжатия. В частности, в диссертации приведена расчетная зависимость критического давления начала фазового перехода от начальной пористости образца графита, позволяющая предсказать параметры начала превращения.

Методы исследования. Для решения поставленной задачи использовался численный метод Уилкинса сквозного счета с применением псевдовязкости, позволяющий автоматически получать многоволновые конфигурации без отслеживания фронта каждой волны, который был обобщен для описания фазовых переходов.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на конференциях: "Краевые задачи и математическое моделирование" 8-я Всероссийская научная конференция, (Новокузнецк, 2006 г.); XXI Международной конференции "Уравнения состояния вещества" (Эльбрус, 2006 г.); 7-й Всероссийской научной конференции "Краевые задачи и математическое моделирование" (Новокузнецк, 2004 г.); XII конференции молодых ученых, МФТИ, (Москва, 1987 г.); XI конференции молодых ученых, МФТИ, (Москва, 1986 г.); Всесоюзной конференций молодых ученых, (Новосибирск, 1986 г.); 1-й краевой научно-практической конференции "Молодые ученые и специалисты народному хозяйству" (Красноярск, 1985 г.); Всесоюзной конференции молодых ученых "Моделирование процессов гидрогазодинамики и энергетики" (Новосибирск, 1985 г.); I Всесоюзной конференции "Механика неоднородных структур" (Львов, 1983 г.); на семинаре отдела прикладной гидродинамики Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, на объединенном семинаре "Информационно-вычислительные технологии" Института вычислительных технологий, на семинарах под руководством академика РАН Фомина В.М. Инсти-

тута теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 10 печатных работ, список которых приведен в конце автореферата.

Личный вклад автора. Работа целиком выполнена лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 115 страницах, содержит 30 рисунков и 3 таблицы. Список литературы содержит 92 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении диссертации обосновывается актуальность темы диссертации, формулируются цели исследования и кратко излагаются результаты, полученные в каждой главе.

В главе 1 изложена модель движения двухфазной конденсированной среды с физико-химическими превращениями в односкоростном и двухтемпературном приближении, проведен термодинамический анализ, определен тип исследуемой системы, в случае, когда система гиперболична, приведены соотношения на характеристиках, выписаны законы сохранения.

Скорости фазовых переходов очень велики (характерные времена физико-химических превращений составляют величины порядка 10^{-7} с), но температурное равновесие устанавливается сравнительно медленно, поэтому предполагается, что существует обмен теплом между фазами, т.е. температуры фаз не совпадают. Релаксация температур между фазами может происходить и при движении гетерогенной среды без фазовых переходов, что описывается предложенной моделью.

В разделе 1.1 выписана замкнутая система уравнений движения смеси в лагранжевых переменных в одномерном случае, которая подвергается исследованию.

В разделе 1.2 проведен термодинамический анализ этой системы.

В разделе 1.3 определен тип системы и в случае, когда система является гиперболической, выписаны соотношения на характеристиках. Тип исследуемой системы уравнений определяется знаком величины

$$D = \frac{1}{\Delta} \left[a \left[\rho_{22} \frac{\partial \sigma_2^{11}}{\partial \rho_{22}} + \gamma_2 (-P_{T2} + \tau_2^{11}) \right] + b \left[\rho_{11} \frac{\partial \sigma_1^{11}}{\partial \rho_{11}} + \gamma_1 (-P_{T1} + \tau_1^{11}) \right] + \right. \\ \left. (am_1 + bm_2)(\tau_1^{11} - \tau_2^{11}) - \right. \\ \left. \rho_0 m_1^2 m_2^2 \rho_{11} \rho_{22} \frac{\partial e_1}{\partial T_1} \frac{\partial e_2}{\partial T_2} (\gamma_1 \sigma_1^{11} - \gamma_2 \sigma_2^{11}) \left(\rho_{11} \frac{\partial \tau_1^{11}}{\partial \rho_{11}} - \rho_{22} \frac{\partial \tau_2^{11}}{\partial \rho_{22}} - (\tau_1^{11} - \tau_2^{11}) \right) \right] \frac{\rho}{\rho_0^2},$$

где $\Delta = a + b$, $a = \rho_0 \rho_{11}^2 \rho_{22} m_1 m_2^2 \frac{\partial e_2}{\partial T_2} [e_1, P_1]$,

$$b = \rho_0 \rho_{11} \rho_{22}^2 m_1^2 m_2 \frac{\partial e_1}{\partial T_1} [e_2, P_2], \quad [e_i, P_i] = \left[\frac{\partial e_i}{\partial \rho_{ii}} \frac{\partial P_i}{\partial T_i} - \frac{\partial e_i}{\partial T_i} \frac{\partial P_i}{\partial \rho_{ii}} \right].$$

Она гиперболична, когда $D > 0$ и эллиптически, когда $D < 0$.

Здесь использованы следующие обозначения: u — скорость, ρ_{ii} — истинная плотность, σ_i^{11} , τ_i^{11} , P_i — тензор напряжений, девиатор напряжений и гидростатическое давление, e_i — удельная внутренняя энергия, T_i — температура, m_i — объемная концентрация, γ_i , P_{Ti} — коэффициент Грюнайзена и тепловая составляющая давления i -ой фазы, ρ — плотность смеси, ρ_0 — плотность смеси в начальный момент.

В том случае, когда содержание одной из фаз, например, второй мало, а девиатором напряжений τ_1^{11} и тепловой составляющей давления P_{T1} можно пренебречь, получается соотношение газовой динамики

$$\sqrt{D} = \frac{\sqrt{\rho}}{\rho_0} \sqrt{\rho_{11} \frac{\partial P_1}{\partial \rho_{11}}}.$$

Вдоль характеристики линии тока $\lambda^4 = 0$ выполняются следующие соотношения:

$$-\frac{d_{i4}}{d_{14}} \frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} + \frac{\partial g_i}{\partial t} + \frac{d_{i4}}{d_{14}} \varphi_1 - \varphi_i = 0, \quad i = 2, 3, 5, 6,$$

$$g_2 = \rho_{22}, \quad g_3 = m_1, \quad g_5 = T_1, \quad g_6 = T_2.$$

Величины d_{i4} и φ_i не приводятся вследствие громоздкости записи.

Вдоль характеристик $\lambda = \pm d$ имеем

$$d_{41} \left(\frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} \pm d \frac{\partial \rho_{11}}{\partial r} \right) + d_{42} \left(\frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} \pm d \frac{\partial \rho_{22}}{\partial r} \right) + d_{43} \left(\frac{\partial m_1}{\partial t} \pm d \frac{\partial m_1}{\partial r} \right) \pm$$

$$\pm d \left(\frac{\partial u}{\partial t} \pm d \frac{\partial u}{\partial r} \right) + d_{45} \left(\frac{\partial T_1}{\partial t} \pm d \frac{\partial T_1}{\partial r} \right) + d_{46} \left(\frac{\partial T_2}{\partial t} \pm d \frac{\partial T_2}{\partial r} \right) + \varphi = 0,$$

$$\text{где} \quad \varphi = -(d_{41}\varphi_1 + d_{42}\varphi_2 + d_{43}\varphi_3 + d_{45}\varphi_5 + d_{46}\varphi_6).$$

В разделе 1.4 приведены законы сохранения системы. Из системы уравнений, представленной в форме Коши-Ковалевской, получена система линейно независимых дивергентных уравнений сохранения:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\rho_0}{\rho} \right) + \frac{\partial u}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\sigma^{11} u}{\rho_0} \right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho_1 e_1 + \rho_2 e_2}{\rho} + \frac{u^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(- \frac{\sigma^{11} u}{\rho_0} \right) = 0, \quad P_1 - P_2 = 0.$$

Это законы сохранения массы, количества движения, полной энергии всей смеси и уравнения равенства давлений фаз.

В главе 2 исследуются различные гипотезы замыкания для описания движения пористой смеси нескольких конденсированных компонентов в односкоростном и однотемпературном приближении при отсутствии фазовых переходов и возможность описания смеси как целого с помощью сложного уравнения состояния, учитывающего индивидуальные характеристики составляющих.

В разделе 2.1 изучается основная проблема описания движения смеси в рамках взаимодействующих и взаимопроникающих континуумов, которая состоит в задании условий совместного движения составляющих и определении величин, описывающих их взаимодействие. На примере трехкомпонентной смеси медь-графит-воздух в приближении равных скоростей и температур в фазах (т.е. при $u_i = u$, $T_i = T$, $x_i = \text{const}$, x_i — массовые концентрации) в качестве замыкающих уравнений предлагаются следующие гипотезы для описания связи между давлением смеси и давлениями составляющих:

1. Давления фаз совпадают $P_i = P$.
 2. Давление смеси определяется через давления и объемные концентрации компонентов по формуле $P = \sum_i m_i P_i$.

3. Величина, обратная давлению смеси, определяется через взвешенную сумму слагаемых, обратных давлениям в компонентах:

$$\frac{1}{P} = \sum_i \frac{x_i}{P_i}.$$

Уравнения состояния меди и графита используются в форме Ми-Грюнайзена

$$P_i = A_i \left[\left(\frac{\rho_{ii}}{\rho_{ii0}} \right)^{n_i} - 1 \right] + \gamma_i c_i \rho_{ii} T_i, \quad i = 1, 2.$$

Состояние воздуха описывается уравнением идеального газа

$$P_3 = \gamma_3 c_3 \rho_{33} T_3.$$

Индексами 1, 2, 3 обозначаются соответственно графит, медь и воздух, γ_i — коэффициент Грюнайзена, A_i , n_i — константы сжимаемости, c_i — удельная теплоемкость.

Для проверки применимости полученных гипотез замыкания расчетные адиабаты сопоставлены с данными экспериментов и ранее опубликованными расчетными адиабатами, приведенными в работе Ставера А.М. Как следует из сравнения (рис. 1) наилучшим приближением для пористого материала в области высоких давлений и температур является гипотеза 1. Здесь под пористостью α понимается отношение плотности пористого вещества к плотности монолита того же состава.

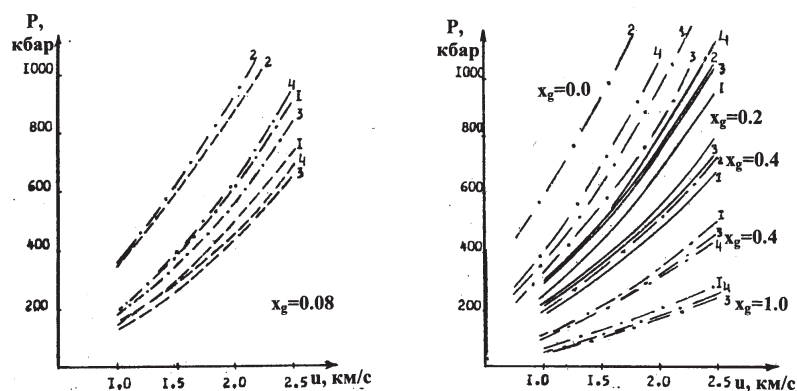


Рис. 1. Ударные адиабаты пористых смесей графита и меди в координатах массовая скорость — давление. Сплошные линии — $\varepsilon = 1$, штрих-пунктирные — $\varepsilon = 0.8$, штриховые — $\varepsilon = 0.7$. Цифры 1, 2, 3 у кривых обозначают номер гипотезы, по которой рассчитывалась эта адиабата, 4 — [1], x_g — массовая концентрация графита, ε — пористость образца.

В разделе 2.2 предлагается уравнение состояния, описывающее многокомпонентную смесь как единый континуум.

В некоторых случаях, когда эффекты относительного движения компонентов несущественны, истинные плотности материалов компонентов достаточно близки между собой и смесь находится в термодинамическом равновесии, т.е. в каждой точке можно определить температуру среды, движение смеси можно описать как движение одного континуума с особым уравнением состояния, учитывающим свойства каждой составляющей и их концентрации. В этом случае число уравнений, описывающих движение смеси, многократно сокращается.

Ляховым Г. М. подобное уравнение получено для трехкомпонентной смеси при условии, что объемные содержания компонентов постоянны, Дуниным С. З. и Сурковым В. В. предложена зависимость среднего давления твердой фазы как функция пористости и внутрипорового давления при статическом нагружении твердой пористой среды, Нигматулин Р. И. привел уравнение состояния равновесной смеси калорически совершенного газа и несжимаемого вещества.

Автором в разделе 2.2.1 предлагается единым образом в форме Ми-Грюнайзена описать уравнения состояния всех компонентов, включая газообразную, и уравнение состояния смеси. Применимость подобного уравнения состояния для воздуха доказана в разделе 2.2.2

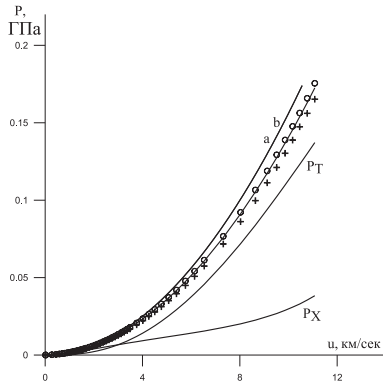


Рис. 2. Ударная адиабата воздуха в координатах массовая скорость — давление.

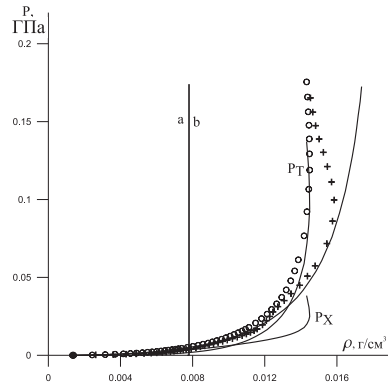


Рис. 3. Ударная адиабата воздуха в координатах плотность — давление.

+ — [2]; здесь P_X — упругая составляющая, P_T — тепловая составляющая давления. Полыми кружками отмечены адиабаты, рассчитанные по уравнению состояния с переменным показателем сжимаемости, а, б — ударные адиабаты, рассчитанные по уравнению состояния идеального газа, а — для слабых ударных волн, б — для сильных ударных волн (предельное сжатие).

проведением сравнения рассчитанных с его помощью ударных адиабат и имеющихся в литературе данных (рис. 2, 3).

Хорошее совпадение ударных адиабат воздуха, рассчитанных по предложенному уравнению состояния, и адиабат, приведенных в Физике взрыва, позволяет сделать вывод о применимости уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена для воздуха.

В разделе 2.2.3 в предположении, что смесь и компоненты описываются уравнениями состояния одинакового типа, параметр A и начальная плотность ρ_0 в уравнении Тета для пористой смеси n конденсированных компонентов (1 — воздух, 2, ..., $n+1$ — конденсированные компоненты) зависят от достигаемых при нагрузке давлений и выражаются через соответствующие параметры составляющих по формулам: при давлениях $P < A_1 < A < A_2 < \dots < A_{n+1}$

$$\frac{1}{\rho_0 A} = \frac{x_1}{\rho_{110} A_1} + \sum_{i=2}^{n+1} \frac{x_i}{\rho_{i10} A_i}, \quad \frac{1}{\rho_0} = \frac{x_1}{\rho_{110}} + \sum_{i=2}^{n+1} \frac{x_i}{\rho_{i10}},$$

при давлениях $P \gg A_1$ последняя зависимость принимает вид:

$$\frac{1}{\rho_0 A} = \sum_{i=2}^{n+1} \frac{x_i}{\rho_{ii0} A_i}, \quad \frac{1}{\rho_0} = \sum_{i=2}^{n+1} \frac{x_i}{\rho_{ii0}},$$

где суммирование ведется только по конденсированным компонентам.

Хорошая согласованность ударных адиабат, рассчитанных по полученному уравнению состояния смеси, с известными расчетными и экспериментальными адиабатами (на рис. 4 приведены некоторые из них) позволяет сделать вывод о применимости предлагаемого уравнения состояния для описания пористой смеси.

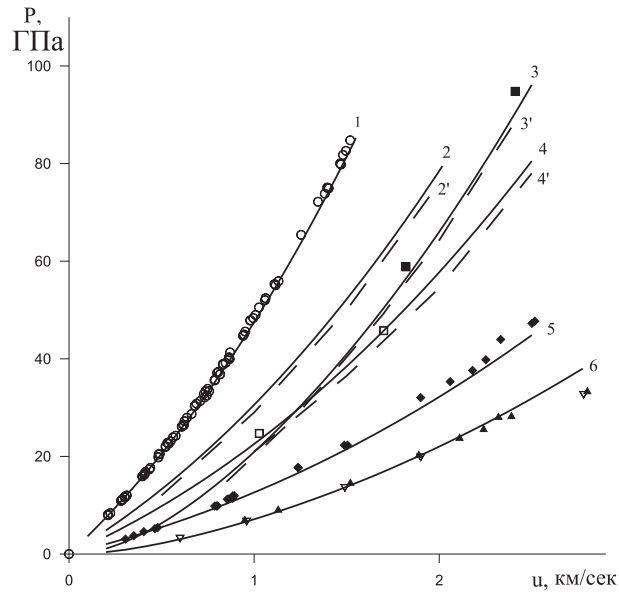


Рис. 4. Ударные адиабаты смесей в координатах массовая скорость — давление:

1 — сплошная медь; 2 — сплошная смесь графита (20%) и меди; 3 — пористая смесь графита (8%) и меди ($\alpha = 0.8$); 4 — сплошная смесь графита (40%) и меди; 5 — сплошной графит; 6 — пористый графит ($\alpha = 0.8$); 2', 3', 4' — расчеты [1] для того же состава, что 2, 3, 4; \square — [1], в опытах не обнаружен алмаз; \blacksquare — [1], в опытах обнаружен алмаз; \blacklozenge — [3]; ∇ — [4]; \circ , \blacktriangle — [5].

В главе 3 предлагаются модели кинетики прямого и обратного фазовых переходов графит-алмаз, численно решена модельная задача, описывающая весь процесс от момента возникновения ударной

волны, в которой происходит прямой фазовый переход, до полной разгрузки вещества, при которой происходит обратный фазовый переход.

В разделе 3.1 описаны физическая и математическая модели задачи. При получении искусственного алмаза методом ударно-волнового нагружения вступают в противодействие два противоречащих друг другу фактора: требование высокой температуры сжатия графита и низкой остаточной температуры алмаза. Для разрешения этого противоречия применяется смесь графита с наполнителем, например, медью. У меди акустический импеданс больше, чем у графита, поэтому давление смеси повышается, а температура сжатия такого наполнителя всегда меньше, чем у графита, и наполнитель охлаждает образующийся при переходе алмаз.

Использование схемы со столкновением противоположно направленных ударных волн является еще одним преимуществом при получении больших давлений при более низких температурах. К тому же при этом амплитуда ударной волны после отражения от центра симметрии практически не изменяется в течение времени движения отраженной ударной волны. В исследуемой задаче встречные ударные волны создаются встречными детонационными волнами от зарядов взрывчатого вещества, которые контактируют с металлическими пластинами, между которыми заключен графитосодержащий образец.

При такой схеме нагружения давления, температуры сжатия и остаточные температуры регулируются мощностью взрывчатого вещества, начальной пористостью образца, сжатием смесей с различной сжимаемостью и теплопроводностью, применением предварительного нагрева или охлаждения.

Законы сохранения для исследуемой слоистой среды (взрывчатое вещество, алюминий, смесь) в плоском одномерном случае в лагранжевой форме описываются следующими уравнениями:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \rho \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial t} + P \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\rho} \right) = 0,$$

где ρ , U , P , E , x , t — плотность, скорость, давление, удельная энергия, лагранжева координата, время.

Уравнения состояния для продуктов детонации и алюминия в исследуемом диапазоне давлений 150 кбар используются соответственно в виде

$$P = (\gamma - 1)\rho e, \quad P = a_1(\eta - 1) + a_2(\eta - 1)^2 + a_3(\eta - 1)^3.$$

Здесь γ — показатель адиабаты продуктов детонации, $\eta = \rho/\rho_{a0}$, ρ_{a0} — начальная плотность алюминия, константы a_1 , a_2 , a_3 взяты из работы [6].

Для описания поведения графитосодержащей смеси используется

уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена:

$$P = A \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right] + \Gamma c \rho (T - T_0); \quad E = E_X + E_T.$$

Здесь Γ — коэффициент Грюнайзена, параметр A и начальная плотность смеси ρ_0 определяются через соответствующие параметры и массовые концентрации x_i конденсированных компонентов по формулам:

$$\frac{1}{\rho_0 A} = \sum_{i=1}^{m_c} \frac{x_i}{\rho_{ii0} A_i}, \quad \frac{1}{\rho_0} = \sum_{i=1}^{m_c} \frac{x_i}{\rho_{ii0}}.$$

Коэффициент Грюнайзена смеси $\Gamma = 2$, удельная теплоемкость смеси c выражается через удельные теплоемкости компонентов по формуле $c = \sum x_i c_i$. Это уравнение состояния хорошо описывает смеси, что подтверждается сравнением расчетов с известными данными, проведенным в главе 2.

Следует отметить, что данный подход к описанию смеси на основе одного уравнения состояния существенно упрощает решение задачи, так как сокращает количество используемых уравнений.

В этом же разделе приведены начальные и граничные условия.

В разделе 3.2 приведена фазовая диаграмма углерода.

В разделах 3.3 и 3.4 описана многоволновая структура системы волн в твердых телах, претерпевающих полиморфные превращения, которая позволяет выяснить влияние параметров, характеризующих кинетику фазовых переходов.

В разделе 3.5 описана предложенная автором модель кинетики прямого перехода. В настоящей работе установлен критерий определения давления P_s начала прямого перехода, которое получается при пересечении ударной адиабаты исходной смеси и линии, задающей границу образования алмаза в экспериментах по ударному сжатию. Правильность выбора подтверждается хорошим согласованием расчетных ударных адиабат образцов графита различной начальной плотности и многочисленных экспериментальных данных (на рис. 5 совпадают изломы на расчетных и экспериментальных адиабатах). Исследовано влияние учета зависимости удельной теплоемкости графита от температуры на параметры начала превращения.

Считается, что превращение графита в алмаз может идти по двум механизмам — диффузионному и мартенситному, поэтому для описания кинетики прямого фазового перехода предлагается две модели. По первой модели считается, что при давлении P_{sk} происходит полное превращение графита в алмаз. Давление полного превращения на адиабате метастабильного графита P_{sk} определяется так, чтобы энергия в этой точке превосходила энергию в точке начала перехода на величину теплоты фазового перехода. Уравнение кинетики при

прямом переходе задается зависимостью:

$$x_d = \begin{cases} 0, & \text{если } P < P_s \\ x_g \frac{P - P_s}{P_{sk} - P_s}, & \text{если } P_s < P < P_{sk} \\ x_g, & \text{если } P > P_{sk}. \end{cases}$$

Здесь считается, что как только давление в ударной волне превысит пороговое давление P_s , соответствующая доля графита мгновенно перейдет в алмаз.

По второй модели считается, что полное превращение происходит при очень высоких давлениях, кинетика описывается уравнениями:

$$x_d = \begin{cases} 0, & \text{если } P < P_s \\ x_g \left(1 - \frac{P_s}{P}\right), & \text{если } P > P_s. \end{cases}$$

Ударные адиабаты, рассчитанные по первой модели, указаны на рис. 5 сплошными линиями, по второй — штриховыми. Сравнение расчетных кривых и экспериментальных данных разных авторов для образцов графита различной начальной пористости показывает, что вторая модель лучше описывает адиабаты при высоких давлениях. Значение начальной пористости указано рядом с кривой. Здесь под пористостью m понимается отношение плотности монолита к плотности пористого вещества.

Проведено исследование зависимости критического давления начала перехода от начальной пористости образца графита (рис. 6).

При описании фазовых переходов в смеси графита и меди считается, что добавление меди не изменяет фазовую диаграмму углерода и параметры, определяющие начало и завершение фазовых переходов.

В нестационарной задаче кинетика прямого фазового перехода в пористой смеси графита и меди описывается соотношениями:

$$\frac{dx_d}{dt} = \begin{cases} 0, & \text{если } P < P_s \\ \frac{x_g(t)}{\tau_0} \frac{P - P_s}{P_{sk} - P_s}, & \text{если } P_s < P < P_{sk} \\ 0, & \text{если } P > P_{sk} \end{cases}$$

Здесь параметр τ_0 — характерное время фазового перехода, множитель $x_g(t)$ учитывает зависимость скорости превращения от количества исходного материала.

В разделе 3.6 описана модель кинетики обратного перехода. В данной задаче учтено, что при разгрузке получившийся алмаз претерпевает обратный фазовый переход, и предложена модель кинетики обратного перехода, зависящая от одного внешнего параметра — температуры графитизации.

Давление P_{sag} , температура T_{sag} и плотность ρ_{sag} , характеризующие начало обратного превращения, определяются пересечением линии равновесия графит-алмаз и изэнтропы разгрузки из состояния,

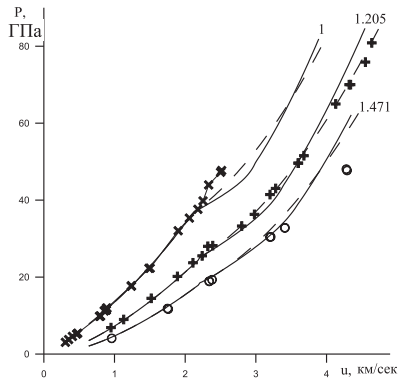


Рис. 5. Ударные адиабаты образцов графита, претерпевающих фазовый переход, в координатах масса-скорость-давление. \times - [3]; $+$, \circ - [5]

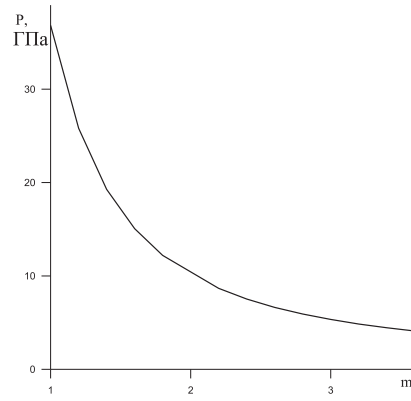


Рис. 6. Зависимость критического давления начала перехода графит-алмаз от начальной пористости графита m .

достигнутого при нагружении. Величины P_{agk} и T_{agk} , характеризующие полное обратное превращение, определяются пересечением изэнтропы Пуассона из состояния полной графитизации при нормальном давлении и линии равновесия фаз.

Кинетика обратного фазового перехода задается следующими соотношениями:

$$\Delta x_d = \begin{cases} x_{d*} \frac{P_{sag}}{P_{agk}}, & \text{если } P_{sag} < P_{agk}, \\ x_{d*}, & \text{если } P_{sag} > P_{agk}, \end{cases}$$

Здесь x_{d*} — массовая доля алмаза, образовавшаяся после прямого перехода. Временной фактор при описании обратного фазового перехода не учитывается.

Адекватность описания процесса фазового превращения и найденных критических параметров перехода проверяется и уточняется сравнением расчетных данных с экспериментальными данными [7]. На рис. 7 приведены кривые, показывающие процентный выход алмаза в зависимости от давления нагружения и температуры графитизации при нормальном давлении. Числа над кривыми показывают значения температуры графитизации. Качественное совпадение позволяет сделать вывод о применимости модели.

Законы сохранения совместно с уравнениями, задающими границы прямого и обратного фазовых переходов, при заданных уравне-

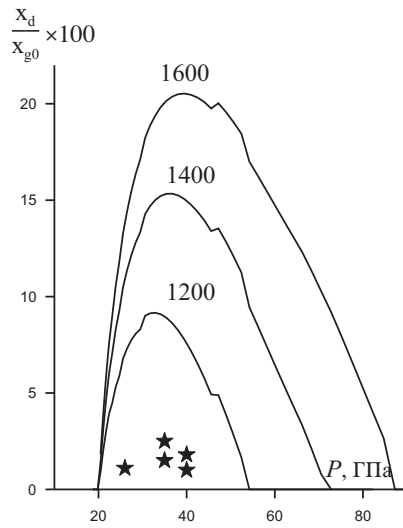


Рис. 7. Доля алмаза, сохранившегося после разгрузки (%); исходная плотность графита $\rho_{g0} = 1.65$, x_d — массовая концентрация сохранившегося алмаза, x_{g0} — начальная массовая концентрация графита; * - [7].

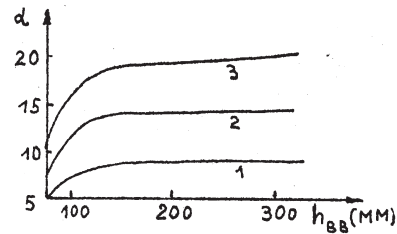


Рис. 8. Зависимость выхода алмаза α (%) после разгрузки от толщины заряда при $\tau_0 = 0.2$ мкс для различных значений температуры графитизации: 1 — 1100 K, 2 — 1500 K, 3 — 2000 K.

ниях состояния и величинах τ_0 , P_s , P_{sk} , P_{sag} , P_{agk} , определяющих кинетику, составляют замкнутую в области непрерывного движения систему, решаемую с соответствующими начальными и граничными условиями.

В разделе 3.7 описан метод расчета и приведены конечно-разностные уравнения метода Уилкинса сквозного счета.

В разделе 3.8 приведены результаты расчетов. Расчеты, проведенные с использованием метода сквозного счета, предложенного Уилкинсом, позволяют оценить характерное время прямого фазового перехода τ_0 . Изменением типа и массы (характеризуется толщиной h_{BB}) накладного заряда можно варьировать давления нагружения. Количественное исследование влияния характерных параметров фазовых переходов проводится с помощью вариации кинетических констант. Определяется влияние параметров нагружения на результирующий выход алмаза, динамику процессов прямого и обратного фазовых переходов. На рис. 8 приведены зависимости выхода алмаза α в процен-

тах к исходному весу графита после разгрузки от толщины заряда взрывчатого вещества (метилнитрат) при $\tau_0 = 0.2$ мкс для различных значений внешнего параметра — температуры графитизации T_g . Быстрый рост α при $h_{BV} < 50$ мм объясняется увеличением полноты прямого фазового перехода из-за увеличения длительности импульса давления в падающей ударной волне. При увеличении h_{BV} вплоть до 300 мм этот эффект компенсируется усилением обратного фазового перехода.

В Заключении сформулированы основные результаты диссертации.

1. На основе механики гетерогенных сред построена и математически исследована модель движения двухфазной конденсированной среды с физико-химическими превращениями в однодавленческом односкоростном двухтемпературном приближении.
2. В рамках односкоростного и однотемпературного приближения предложено уравнение состояния сплошной и пористой смеси конденсированных компонент, параметры которого определяются через соответствующие параметры и массовые концентрации индивидуальных веществ, что позволяет описывать смесь в виде единого континуума как при нагрузке, так и при разгрузке.
3. Разработана математическая модель ударно-волнового нагружения и последующей разгрузки графитосодержащего образца с учетом происходящих в нем фазовых переходов, предложены уравнения кинетики для описания прямого и обратного фазовых переходов, предложен способ определения кинетических коэффициентов.
4. В результате численного исследования построенной модели определен критерий получения алмаза с учетом прямого и обратного переходов, найдены условия, при которых алмаз не может быть получен вследствие того, что при нагрузке давление было недостаточным для начала прямого превращения, либо при нагружении была достигнута высокая температура.
5. Определен тип (метилнитрат) и толщина $h_{BV} \sim 50$ мм накладного заряда ВВ, создающего падающую ударную волну амплитуды $P \sim 130$ кбар, усиливающуюся при отражении до $P \sim 520$ кбар, позволяющие увеличить полноту фазового перехода из-за увеличения длительности импульса давления в отраженной ударной волне до характерного времени превращения графита в алмаз.

Автор выражает благодарность научному руководителю В. М. Фомину, а также А. М. Ставеру за физическую постановку задачи.

По теме диссертации опубликованы следующие работы.

- 1 Бельхеева Р.К. Моделирование прямых и обратных фазовых переходов при ударно-волновом нагружении графитосодержащего образца // Сиб. журнал индустриальной математики. 2007. Т. X, № 1(29). С. 25-32.
- 2 Бельхеева Р.К. Моделирование фазовых переходов при ударно-волновом нагружении графитосодержащего образца // Физика экстремальных состояний вещества — 2006 / Под ред. ак. В. Е. Фортова и др. Черноголовка, 2006. С. 117-119.
- 3 Бельхеева Р.К. Моделирование фазовых переходов при ударно-волновом нагружении образца // Уравнения состояния вещества: Тез. докл. XXI Международной конференции / Под ред. ак. Фортова В. Е. Черноголовка, 2006. С. 72.
- 4 Бельхеева Р.К. Моделирование прямых фазовых переходов при ударно-волновом нагружении графита // Краевые задачи и математическое моделирование / Под ред. Каледина В. О. Новокузнецк, 2006. С. 147-150.
- 5 Бельхеева Р.К. Математическое моделирование поведения многокомпонентных смесей с помощью составного уравнения состояния // Краевые задачи и математическое моделирование / Под ред. Каледина В. О. Новокузнецк, 2004. С. 45-47.
- 6 Бельхеева Р.К. Математическое моделирование фазовых переходов при ударно-волновом нагружении графитосодержащего образца // Тр. 12 Конф. молодых ученых / Долгопрудный, МФТИ, 1987. Деп. в ВИНТИ, № 6379-В87. 1987. С. 107-112.
- 7 Бельхеева Р.К. Термодинамическое уравнение состояния для описания поведения смеси медь-графит-воздух при больших давлениях и температурах // Моделирование процессов гидрогазодинамики и энергетики / Под ред. д.ф.-м.н. Фомина В. М. Новосибирск, 1985. С. 231-235.
- 8 Бельхеева Р.К. Исследование фазовых переходов в смеси графит-медь-воздух // Молодые ученые и специалисты народному хозяйству: Тез. 1 краев. научно-практич. конф. / Отв. за вып. Втюрин А. Н. Красноярск, 1985. С. 87.
- 9 Бельхеева Р.К. Исследование свойств системы уравнений двухфазной конденсированной среды с физико-химическими превращениями // Численные методы механики сплошной среды. 1984. Т. 15, № 3. С. 12-25.
- 10 Бельхеева Р.К. Термодинамическое уравнение состояния для описания поведения смеси медь-графит при больших давлениях и температурах // Механика неоднородных структур: Тез. докл. / Отв. ред. Подстригач Я. С. Киев: Наук. думка, 1983. С. 24.

Цитируемая литература

- 1 Ставер А.М. Исследование термодинамики фазового перехода графита в алмаз при ударном нагружении смесей углерод + металлы // Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах. Черноголовка, 1978. С. 131-136.
- 2 Физика взрыва / Под ред. К.П. Станюковича. М.: Наука, 1975. С. 704.
- 3 Coleburn N.L. The compressibility of pirolytic graphyte // J. Chem. Phys. 1964. V. 40, № 1. P 71-77.
- 4 Павловский М.Н., Дракин В.П. К вопросу о металлической фазе углерода // Письма в ЖЭТФ. 1966. Т. 4, № 5. С. 169-172.
- 5 Mc Queen R.G., Marsh S.P. Hugoniots of graphytes of various initial densities and equation of state of carbon // IUTAM Symp. on High Dynamic Pressure, Paris, 1967. N. Y. 1968. P. 207-216.
- 6 Уилкинс М.Л. Расчет упруго-пластических течений // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 212-263.
- 7 Morris D. G. An investigation of the shock-induced transformation of graphite to diamond // J. Appl. Phys. 1980. V. 51. №. 4. P. 2059-2065.

Ответственный за выпуск Р.К. Бельхеева

Подписано в печать _____ 2007
Формат бумаги 60 × 84/16, Усл. печ. л. 1.0,
Уч.-изд. л. 1.0, Тираж 100 экз., Заказ № _____

Отпечатано на ризографе ЗАО "ДОКСЕРВИС"
630090, Новосибирск, Институтская, 4/1