УДК 539.182

КВАЗИСТАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УСТАНОВЛЕНИЯ ДАВЛЕНИЯ В МНОГОКОМПОНЕНТНОМ ПОРИСТОМ ГЕТЕРОГЕННОМ МАТЕРИАЛЕ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧЕНИЯ

© *А. В. Острик, *Е.А. Острик*

Центральный физико-технический институт МО РФ, г. Сергиев Посад
* Московский физико-технический институт, г. Москва

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 99-01-01285

Предлагается физико-математическая модель для расчета начального давления, возникающего при объёмном поглощении рентгеновского излучения гетерогенным материалом. Используется метод элементарной структурной ячейки. Предполагается, что длительность воздействия излучения значительно больше характерных времен акустической релаксации компонент гетерогенного материала, и процесс выравнивания давления в ячейке можно считать квазистатическим. Поведение каждого из материалов описывается в гидродинамическом приближении калорическим уравнением состояния, в котором учет пористости осуществляется введением зависимости пористости материала от давления и удельной внутренней энергии. Приводятся результаты расчетов для гетерогенного материала, состоящего из эпоксидного связующего и наполнителя в виде включений из диоксида олова (SnO_2).

QUASI-STATICAL MODEL OF PRESSURE ADEQUATION IN MULTICOMPONENT POROUS GETEROGENEOUS MATERIAL UNDER RADIATION ACTION

*A.V. Ostrik, *E.A. Ostrik*

Central Institute of Physics and Technology MOD RF
* Moscow Institute of Physics and Technology

Physical and mathematical model for calculation of initial pressure formed by X-ray radiation absorption by heterogeneous material is proposed. Method of elemental structure cell is used. It is assumed that continuance of radiation action is a lot more then characteristic times of acoustic relaxation of heterogeneous material components and adequation process for pressure may be regarded as quasi-statical. Material behaviour is described by calorycal equation of state, and porosity accounting is realized by introduction of material porosity dependence from pressure and specific internal energy. Calculation result for heterogeneous material consisting of epoxy binder and discrete filler (SnO_2) is adduced.

В последние годы в конструкциях различного назначения нашли широкое применение в качестве защитных покрытий от рентгеновского излучения (РИ) высокопористые гетерогенные материалы (ГМ) [1,2]. Для описания волновых процессов в ГМ при воздействии на них РИ предложено достаточно много весьма общих моделей, учитывающих скоростную и температурную неравновесность компонент (см. например, [3]). Однако эти модели содержат большое число механических и теплофизических характеристик материалов, значения которых определяются экспериментально и для большинства новых практически важных ГМ неизвестны. В то же время при более жестких, но имеющих место во многих случаях воздействия РИ, предположениях возможно построение менее общих моделей, использующих только общеизвестные константы материалов компонент ГМ. Целью настоящей работы является построение такой модели для многокомпонентного пористого ГМ с дисперсным наполнителем.

1. Постановка задачи и основные уравнения модели

Модель строится, исходя из следующих предположений:

1) характерные размеры компонент ГМ (включений наполнителей) значительно меньше толщины зоны энерговыделения от РИ;

2) длительность воздействия РИ мала по сравнению со временем акустической релаксации зоны энерговыделения;

3) время акустической релаксации каждой из компонент много меньше времени энерговыделения (длительности воздействия РИ);

4) характерные времена теплообмена между компонентами ГМ много больше времени энерговыделения;

5) сопротивление материалов на сдвиг несущественно [4], и поведение каждой из компонент ГМ описывается калорическим уравнением состояния $P_i = P_i(\rho_i, E_i)$ (ρ_i, E_i – удельный объем сплошного материала и внутренняя энергия i-й компоненты; $i=1,\ldots, N$), а учет пористости осуществляется по модели Херрманна [5] введением зависимости пористости α_i от давления и внутренней энергии и пересчетом удельного объема пористого материала v_{pi} в сплошной по соотношению $v_i = v_{ip}/\alpha_i$.

Для расчета давления в ГМ используется метод элементарной структурной ячейки [6]. Ячейка представляет собой малую по сравнению с зоной энерговыделения часть ГМ с массовыми долями компонент, равными соответствующим долям во всем материале (рис.1). Предположение 1 позволяет считать каждую из компонент равномерно прогретой в пределах ячейки и проводить по ней усреднение параметров состояния ГМ. В соответствии с предположением 2 механическое действие от РИ можно рассматривать поэтапно. На первом этапе происходит установление давления в ячейке постоянного объёма, поскольку волновое движение во всей области энерговыделения ещё не успевает развиться. Второй этап соответствует стадии волновых процессов и разрушений во всем ГМ в целом. На этом этапе в силу предположения 1 можно заменить гетерогенный материал гомогенным с эффективными механическими характеристиками. Поэтому с точки зрения исследования влияния гетерогенности на механическое действие РИ основной интерес в данном случае представляет расчёт первого этапа, результатом которого должен быть профиль давления, формирующийся в ГМ по окончанию облучения. В каждой элементарной ячейке это давление определяется удельными энергиями, поглощенными в компонентах ГМ.

Расчет давления P по известному (рассчитанному методом Монте-Карло [1]) энерговыделению в компонентах строится по предлагаемой модели следующим образом. При выполнении предположения 3 процесс выравнивания давления в ячейке между компонентами ГМ во время воздействия РИ можно считать квазистатистатическим и, используя предположение 5, записать $N-1$ условий равенства изменений давлений в компонентах при подводе к ним энергии РИ (в качестве независимой переменной удобно принять подводимую излучением к единице массы ГМ энергию Q)

$$\left(\frac{\partial P_1}{\partial \rho_1}\right)_{E_1}\frac{d\rho_1}{dQ}+\left(\frac{\partial P_1}{\partial E_1}\right)_{\rho_1}\frac{dE_1}{dQ}=\left(\frac{\partial P_2}{\partial \rho_2}\right)_{E_2}\frac{d\rho_2}{dQ}+\left(\frac{\partial P_2}{\partial E_2}\right)_{\rho_2}\frac{dE_2}{dQ}=\ldots$$
$$\ldots=\left(\frac{\partial P_N}{\partial \rho_N}\right)_{E_N}\frac{dE_N}{dQ}+\left(\frac{\partial P_N}{\partial E_N}\right)_{\rho_N}\frac{dE_N}{dQ}. \tag{1}$$

Кроме того, для каждой из компонент, рассматриваемой как подсистема ГМ, выполняется первое начало термодинамики, которое в дифференциальной форме с учетом отсутствия теплообмена (предположение 4) имеет вид ($i=1,\ldots N$)

$$\frac{dE_i}{dQ}-\frac{P_i(\rho_i,E_i)}{\rho_i^2}\frac{d\rho_i}{dQ}=\frac{\varepsilon_i}{x_i}, \tag{2}$$

где x_i, ε_i – массовая концентрация и доля поглощенной энергии для i-й компоненты ГМ.

Условие сохранения удельного объема ячейки (это условие следует из сохранения массы и объема ячейки в процессе энергоподвода) также записывается в дифференциальной форме

$$\sum_{i=1}^{N}\left\{\left[\left(\frac{\partial\alpha_i}{\partial P_i}\right)_{E_i}-\frac{\alpha_i}{\rho_i}\right]\frac{d\rho_i}{dQ}+\left[\left(\frac{\partial\alpha_i}{\partial P_i}\right)_{E_i}\left(\frac{\partial P_i}{\partial E_i}\right)_{\rho_i}+\left(\frac{\partial\alpha_i}{\partial E_i}\right)_{P_i}\right]\frac{dE_i}{dQ}\right\}=0, \tag{3}$$

где пористости компонент ГМ считаются заданными функциями давления и удельной внутренней энергии $\alpha_i=\alpha_i(P_i, E_i)$.

В результате математическая формулировка задачи сводится к системе $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений относительно $2N$ неизвестных: плотностей и удельных внутренних энергий компонент ГМ. Начальными условиями для полученной системы уравнений служат плотности ρ_{0i} и удельные энергии E_{0i} компонент ГМ до облучения:

$$\rho_i(0)=\rho_{0i},\qquad E_i(0)=E_{0i}. \tag{4}$$

Система обыкновенных дифференциальных уравнений решается методом Рунге–Кутта пятого порядка с автоматическим выбором шага [7]. В качестве дополнительного контроля точности численного интегрирования системы дифференциальных уравнений, а также правильности реализации физической модели используются условия баланса удельной внутренней энергии (следующие из условия сохранения массы и внутренней энергии при сохранении объема ячейки) и сохранения удельного объема ячейки, записанные в форме конечных соотношений:

$$\sum_{i=1}^{N}x_i(E_i-E_{0i})=Q,\quad \sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{\rho_i}\alpha_i(P_i,E_i)=\frac{1}{\rho_0}, \tag{5}$$

где $\rho_0=\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{\rho_{i0}}\alpha_{i0}\right)^{-1}$ – начальная средняя плотность ГМ.

Таким образом, предложенная модель позволяет рассчитывать давление в многокомпонентном ГМ с учетом изменения пористости компонент и фазовых переходов в них с той степенью точности, с которой эти процессы описываются наиболее часто используемым в приложениях калорическим уравнением и моделью поведения пористых сред Херрманна.

Для получения верхней оценки давления можно рассмотреть случай мгновенного подвода энергии к компонентам ГМ с последующим адиабатическим изменением их объемов до достижения равновесного состояния ячейки (модель адиабатического расширения). Тогда вместо уравнений термодинамики (2) следует использовать уравнения адиабат

$$\frac{dE_i^a}{d\rho_i}=\frac{P_i\left(\rho_i,E_i^a\right)}{\rho_i^2}, \tag{6}$$

численное интегрирование которых при начальных условиях $E_i^a(0)=E_{0i}+\varepsilon_i Q/x_i$ позволяет построить зависимости $E_i=E_i^a(\rho_i)$. Используя эти зависимости и записывая соотношения для равенства давлений между компонентами ГМ совместно с условием несжимаемости ячейки, получаем систему N нелинейных уравнений относительно плотностей материалов ρ_i:

$$\begin{cases} P_1\left(\rho_1,E_1^a(\rho_1)\right)=P_2\left(\rho_2,E_2^a(\rho_2)\right),\\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\ P_{N-1}\left(\rho_{N-1},E_{N-1}^a(\rho_{N-1})\right)=P_N\left(\rho_N,E_N^a(\rho_N)\right),\\ \sum_{i=1}^{N}\frac{x_i}{\rho_i}\alpha_i\left(P_i\left(\rho_i,E_i^a(\rho_i)\right),E_i^a(\rho_i)\right)=\frac{1}{\rho_0}. \end{cases} \tag{7}$$

Следует отметить, что модель адиабатического выравнивания давления между компонентами ГМ не согласуется с предположением 3, и процесс установления равновесия в ячейке после мгновенного подвода энергии будет сопровождаться волновыми процессами, перераспределяющими энергию между компонентами. Поэтому квазистатическое рассмотрение мгновенного подвода энергии может служить лишь для верхней оценки давления, рассчитываемого по предлагаемой модели.

2. Результаты расчетов

В численных исследованиях рассматривался ГМ [4], состоящий из эпоксидно-полиамидной композиции (связующего), обладающей высокой температурной стойкостью, и диоксида олова SnO_2 (дисперсного наполнителя), хорошо поглощающего излучение. Поведение компонент этого ГМ описывалось десяти-константным калорическим уравнением состояния [8, 9], в котором давление и удельная внутренняя энергия представляются суммами холодных и тепловых составляющих. Холодные составляющие берутся в соответствии с потенциалом Леннарда-Джонса в степенном виде:

$$E_c = \frac{c_0^2}{m-n}\left(\frac{\delta^{m-1}-1}{m-1}-\frac{\delta^{n-1}-1}{n-1}\right), \tag{8}$$

$$P_c = \frac{\rho_0 c_0^2}{m-n}(\delta^m - \delta^n), \tag{9}$$

где $\delta=\rho/\rho_0$ – степень сжатия; ρ_0, c_0 – плотность и скорость звука в холодном веществе при нулевом давлении; m, n – эмпирические константы.

Тепловая составляющая давления P_T определяется по тепловой энергии $E_T=E-E_c$ с помощью коэффициента Грюнайзена $Г$:

$$P_T = \tilde{A}\rho E = \tilde{A}\rho(E-E_c), \tag{10}$$

$$\tilde{A} = \left[\tilde{A}_g + \frac{a\delta}{1+b\delta}\right]\frac{Q_s+\eta E_T}{Q_s+\xi E_T}, \tag{11}$$

где Q_s – теплота сублимации холодного вещества; $Г_g$ – коэффициент Грюнайзена холодного пара; a, b, η, ξ – эмпирические константы.

Соотношения (8)-(11) позволяют рассчитать давление $P=P_c+P_T$ в зависимости от внутренней энергии и плотности. Параметры уравнения состояния для компонент рассматриваемого ГМ представлены в табл.I.

Таблица I

Параметры уравнения состояния

материал	ρ_0 г/см³	c_0 км/с	Q_s кДж/г	a	$в$	η	ξ	m	n	$Г_g$
эпоксидно-полиамидной композиции	1,2	2,2	3,2	0,2	0,5	1	3	2	1,15	2/3
диоксид олова	7	5	2,1	2	0,5	1	3	5	4	2/3

На рис.2 показаны зависимости начального давления в материале от удельной поглощенной энергии, рассчитанные по различным моделям (линейное приближение построено по соотношению из [10]). Видно, что при небольших значениях Q, когда отсутствуют фазовые переходы в компонентах ГМ, расчетные зависимости для линейного (кривая 2), адиабатического (кривые 3) и рассматриваемого (кривая 1) приближений совпадают между собой. При дальнейшем увеличении подводимой энергии линейное приближение, не учитывающее фазовых переходов и обмена энергией между компонентами, дает значительную погрешность. Адиабатическое приближение в области двухфазных состояний приводит к неоднозначному решению (эта неоднозначность может быть устранена корректировкой используемых УРС в области двухфазности с помощью процедуры, описанной в [11]). Решение, полученное по предлагаемой модели, однозначно, и лежит ниже верхней ветви решения адиабатического приближения.

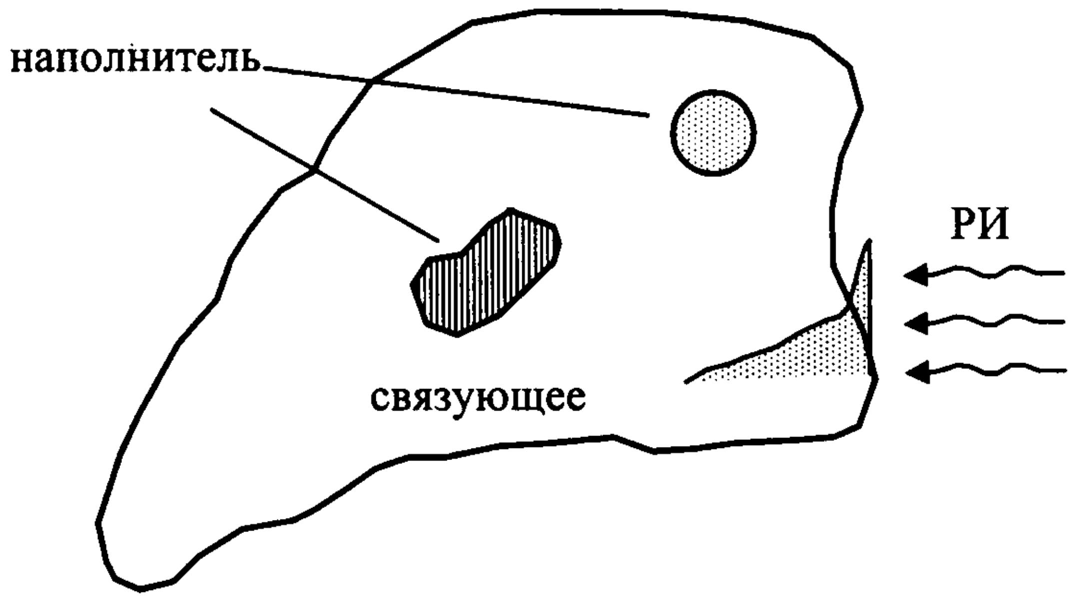

Рис.1. Элементарная ячейка ГМ.

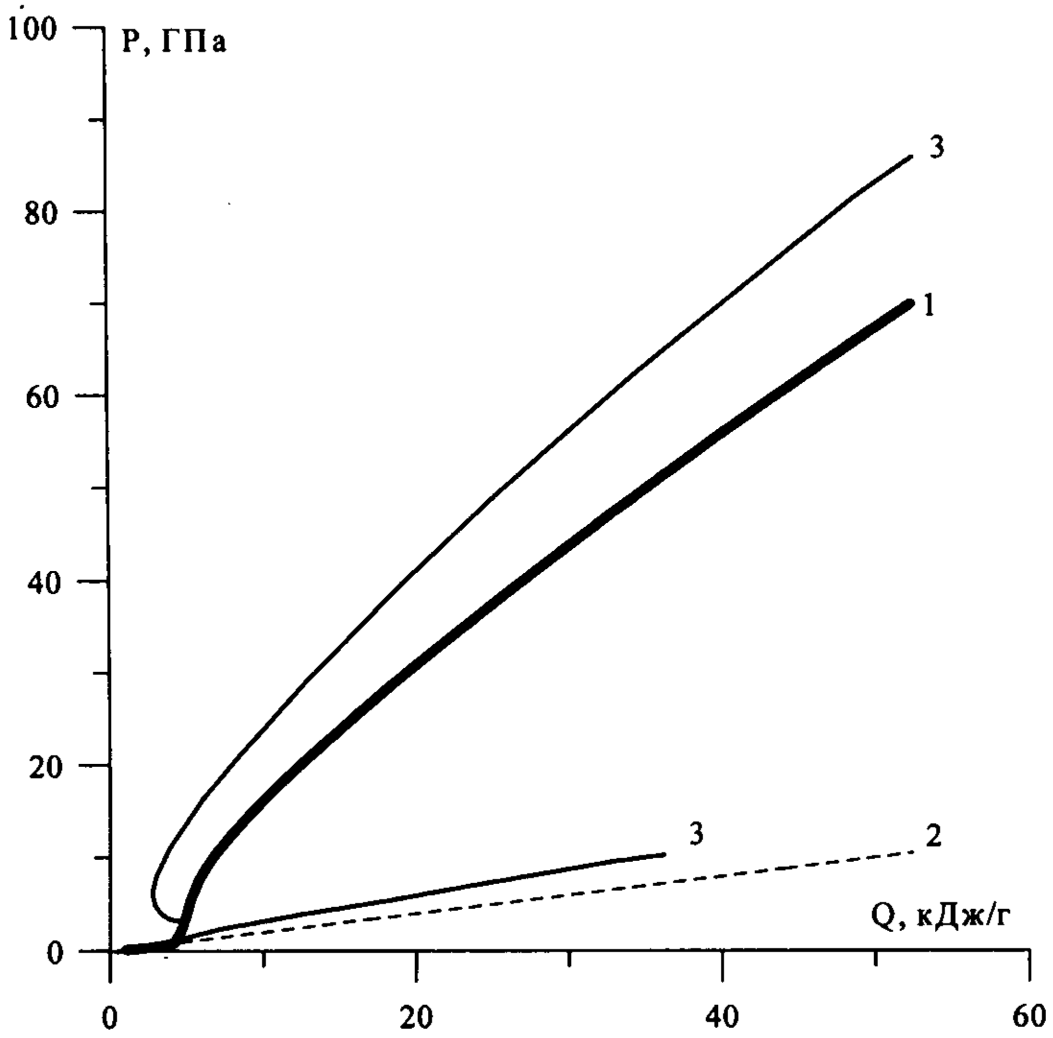

Рис.2. Зависимость давления в ячейке от поглощенной удельной энергии.

Таким образом, при небольших уровнях воздействия (вплоть до начала фазовых переходов) с достаточной степенью точности можно пользоваться наиболее простым линейным приближением. В области высоких плотностей подводимой энергии от жесткого РИ целесообразно использовать предлагаемую модель квазистатического выравнивания давления, как более адекватно отражающую физические процессы, протекающие в гетерогенном материале при его облучении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Острик А.В., Потапенко А.И.* Математическое моделирование механического действия излучения на гетерогенные материалы // Тезисы докладов конференции "Ударные волны в конденсированных средах". – С. Петербург. 1998. с. 156–158.
2. *Ефремов В.П., Острик А.В., Потапенко А.И., Фортов В.Е.* Метод расчета механического действия импульсного излучения на гетерогенные преграды, содержащие микросферы. // Тезисы докладов конференции "Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество". – Терскол. 1999, с.52–54.
3. *Буряков О.В., Куропатенко В.Ф.* Численное моделирование неустановившихся течений двухкомпонентной гетерогенной среды с учетом скоростной и температурной неравновесности компонент. // ВАНТ, 1986, вып.3, с.3–9.
4. *Острик А.В., Острик Е.А.* Расчет давления при воздействии рентгеновского излучения на гетерогенный материал с пластическим связующим. // МНТС "Технология". Сер. Конструкции из КМ.1999, № 2.
5. *Херрманн В.* Определяющие уравнения уплотняющихся пористых материалов. // Механика № 7 – М.: Мир, 1976, с.178-216.
6. *Арутюнян Г.М.* Термогидродинамическая теория гетерогенных систем. – М.: Физматлит, 1994, 272с.
7. *Дж. Форсайт, М.Малькольм, К.Моулер.* Машинные методы математических вычислений.- М: Мир, 1980. 280с.
8. *Куропатенко В.Ф., Нечай В.З., Сапожников А.Т., Севастьянов В.Е.* Уравнение состояния с учетом испарения. Доклад на III Всесоюзном семинаре по моделям механики сплошной Среды. – Новосибирск, 1973.
9. *Волкова А.А. и др.* Математическое моделирование инициирования ТЭНа лазерным излучением. // Сборник "Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах." – Черноголовка, ИХФ АН, 1978, с.46-50.
10. *Anderholm N.C., Anderson Ph. D.* Laser-Heating Studies of Composite Materials. // Journal of Applied Physics. April 1972, № 4, v.43, p.1820.
11. *Куропатенко В.Ф.* Уравнения состояния в математических моделях механики и физики // Сборник научных трудов "Экстремальные состояния вещества" под редакцией чл. кор. АН СССР В.Е. Фортова, к.ф.-м..н. Е.А. Кузьменкова. – М.: ИВТАН, 1991, с.3-38.