

УДК 539.89

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ

ЖУКОВ А. В., КОРНЕЕВ А. И., СИМОНЕНКО В. Г.

Полиморфные превращения, протекающие в ударных волнах, зарегистрированы для многих металлов, окислов, полупроводников, минералов и горных пород [1, 2].

В публикуемой работе предлагается односкоростная модель упругопластической среды, основанная на представлениях теории многофазных смесей [3] и отличная от модели, используемой в [4]. Давление смеси фаз, необходимое для замыкания системы уравнений движения, находится из решения нелинейной системы, первые два уравнения которой являются термодинамическими условиями сосуществования фаз: равенство давлений и температур.

Предложены экспоненциальное условие кинетики фазовых переходов, происходящих по мартенситному типу во фронте волн сжатия и разгрузки, зависящее от энергии активации и разности термодинамических потенциалов фаз и уравнения состояния для шаровой части тензора напряжений α - и ε -фаз фазового перехода в железе.

Численное решение замкнутой системы уравнений, записанной в дивергентном виде, проводится на основе двухшаговой разностной схемы [5]. Для сглаживания осцилляций за фронтом ударной волны применяется метод коррекции потоков [6].

Изложенная модель апробирована для $\alpha \rightleftharpoons \varepsilon$ -фазового перехода в железе в волнах напряжений, инициированных ударом. Численно получен гистерезис превращения. Полученные характерное время прямого и обратного переходов, скорости свободной поверхности, скорости первой и второй ударных волн, напряжение за фронтом второй ударной волны согласуются с известными экспериментальными данными [7], полученными с помощью лазерной интерферометрии.

1. В рамках односкоростной, однотемпературной модели деформируемого твердого тела, в которой каждая фаза характеризуется массовой концентрацией x_i ($\sum x_i = 1$; $i = 1, 2, \dots, n$; n — число фаз) и истинной плотностью ρ_i , рассматривается задача о нормальном соударении пластин. Считается, что в процессе взаимодействия материалы соударяющихся тел следуют упругопластической модели среды, в которой первый инвариант тензора напряжений i -й фазы является функцией плотности ρ_i и внутренней энергии e_i . Система уравнений, описывающая движение смеси фаз, будет иметь вид

$$\partial U / \partial t + \partial F / \partial r = 0, \quad U = \begin{vmatrix} V \\ u \\ E \end{vmatrix}, \quad F = \begin{vmatrix} u \\ \sigma \\ \sigma u \end{vmatrix} \quad (1.1)$$

Здесь u — массовая скорость, $V = 1/\rho$ — удельный объем смеси, ρ — плотность смеси, $E = \sum x_i e_i + u^2/2$ — полная энергия смеси, $\sigma = -P + \tau$ — тензор напряжений, P — давление смеси, τ — компонента девiatorа тензора напряжений, r — лагранжова координата.

В рамках односкоростной модели среды можно обычным образом ввести тензор скоростей деформаций и записать соотношения для компонент девiatorов в виде

$$2\mu (e^* - 1/3 V^* / V) = \tau^* + \lambda \tau \quad (1.2)$$

где $\lambda \geq 0$ определяется с использованием условия текучести Мизеса:

$$\lambda = \frac{2\mu(P, T) W^*}{\sqrt[4]{9}\sigma_s^2(P, T)} - \frac{\sigma_s^*(P, T)}{\sigma_s(P, T)}, \text{ если } W^* > 0 \quad \lambda = \frac{2\mu(P, T) W^*}{\sqrt[4]{9}\sigma_s^2(P, T)} - \frac{\sigma_s^*(P, T)}{\sigma_s(P, T)} \quad (1.3)$$

в противном случае $\lambda = 0$.

Давление смеси фаз, необходимое для замыкания системы уравнений (1.1)–(1.3), находится из решения нелинейной системы уравнений

$$P = P_1(\rho_1, e_1) = P_2(\rho_2, e_2), \quad T = T_1(\rho_1, e_1) = T_2(\rho_2, e_2) \quad (1.4)$$

$$e = x_1 e_1 + x_2 e_2, \quad 1/\rho = x_1/\rho_1 + x_2/\rho_2, \quad e = E - u^2/2$$

Согласно установившимся представлениям [4], активирование предзародышей или эмбрионов новой фазы происходит при превышении давления над пороговым, когда движущая химическая сила уравнивает поверхностную энергию эмбриона и энергию искажения кристаллической исходной матрицы. Происходит мартенситная перестройка кристаллической решетки, основанная на кооперативном движении многих атомов в новые положения, являющиеся термодинамически устойчивыми при этих условиях. Пороговые давления, активизирующие эмбрионы при прямом и обратном переходах, отвечают мартенситным точкам P_{m1} и P_{m2} начала превращений на ударных адиабатах и изэнтропах разгрузки. Для железа $P_{m1} = 13,0$ ГПа, $P_{m2} = 9,8$ ГПа [7]. Величина активационного барьера определяется энергией активации U_0 и сдвиговой прочностью кристаллической решетки L .

Согласно теории переходных состояний [8], при малых отклонениях от положения равновесия $dx_i/dt \sim \exp[U_{oi}/(kT)] \Delta\Phi$ (Φ — термодинамический потенциал). Наличие пороговых значений давления и резкое увеличение скорости реакции при отклонении от линии фазового равновесия позволяют ввести более сильную зависимость 1 от $\Delta\Phi$:

$$\frac{dx}{dt} = -x D \exp\left(\frac{U_0}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{\Phi_1 - \Phi_2}{L}\right) - 1 \right] \quad (1.5)$$

Здесь $x = x_1$ — концентрация первой фазы, $x_2 = 1 - x_1$, $D = \Theta_d/(hT)$, Θ_d — температура Дебая, h — постоянная Планка, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

Для системы уравнений (1.1)–(1.5) ставится краевая задача с начальными условиями при $t=0$ и граничными при $r=0$ и $r=l_0+l$ (l_0 — толщина пластины-ударника, l — толщина пластины-мишени):

$$x(r, 0) = 1, \quad \rho(r, 0) = \rho_0, \quad T(r, 0) = T_0, \quad \sigma(r, 0) = 0, \quad e(r, 0) = 0 \quad (0 \leq r \leq l_0 + l) \quad (1.6)$$

$$u(r, 0) = u_0, \quad E(r, 0) = u_0^2/2 \quad (0 \leq r \leq l_0)$$

$$u(r, 0) = 0, \quad E(r, 0) = 0 \quad (l_0 < r \leq l), \quad \sigma(0, t) = \sigma(l_0 + l, t) \quad (1.7)$$

2. Уравнения состояния фаз, которые при выполнении условий термодинамического равновесия (равенство давлений, температур, химических потенциалов) определяют в соответствии с правилом фаз Гиббса в координатах P, T кривую фазового равновесия [9], имеют вид

$$S_i = S_{oi} + \frac{3R}{A} \ln \left[1 + \frac{e_i - e_{si}(\rho_i)}{K\theta_i(\rho_i)} \right], \quad T_i = T_0 \theta_i(\rho_i) \left[1 + \frac{e_i - e_{si}(\rho_i)}{K\theta_i(\rho_i)} \right] \quad (2.1)$$

$$P_i = P_{si} + \gamma_i(\rho_i) \rho_i [e_i - e_{si}(\rho_i)], \quad \gamma_i(\rho_i) = \gamma_{oi} \rho_{oi} / \rho_i$$

¹ Корнеев А. И., Симоненко В. Г. Теоретическое исследование явления откола в мягких сталях с учетом фазового превращения. — В кн.: Матер. IV научн. конф. по матем. и механ. Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1974, т. 2, с. 163–164.

$$e_{si}(\rho_i) = \frac{9B_{0i}}{2\rho_{0i}a_i^2} \left\{ \exp \left[2a_i \left(1 - \left(\frac{\rho_{0i}}{\rho_i} \right)^{1/3} \right) \right] - 2 \exp \left[a_i \left(1 - \left(\frac{\rho_{0i}}{\rho_i} \right)^{1/3} \right) \right] + \beta_i \right\}$$

$$P_{si}(\rho_i) = \frac{3B_{0i}}{a_i} \left(\frac{\rho_{0i}}{\rho_i} \right)^{-2/3} \left\{ \exp \left[2a_i \left(1 - \left(\frac{\rho_{0i}}{\rho_i} \right)^{1/3} \right) \right] - \exp \left[a_i \left(1 - \left(\frac{\rho_{0i}}{\rho_i} \right)^{1/3} \right) \right] \right\}$$

$$\theta_i(\rho_i) = \exp[\gamma_{0i}(1 - \rho_{0i}/\rho_i)], \quad K = 3RT_0/A$$

Здесь i — индекс фазы, P_{si} , e_{si} — составляющие давления и энергии на изэнтропе сжатия, S — энтропия, $\gamma_i(\rho_i)$ — коэффициент Грюнайзена, B_{0i} — модуль адиабатической сжимаемости, S_{0i} , β_i — нормировочные константы, a_i — подгоночные параметры, A — атомный вес, $T_0 = 293^\circ \text{K}$.

В табл. 1 приведены параметры уравнений (2.1) для α (первая строка) и ϵ (вторая строка) фаз железа, определенные с использованием ударной адиабаты [10] (размерности: B_0 [ГПа], ρ_0 [кг/м³], S_0 [кДж/(кг·град)]). Эти значения параметров определяют следующие термодинамические ве-

Таблица 1

B_0	ρ_0	a	γ_0	S_0	β
178	7850	3,65	1,78	0	1
197,5	8360	3,748	1,94	0,0254	0,0120523

личины в точке фазового перехода (первая строка), где $\Phi_\alpha = \Phi_\epsilon$ на изо-терме $T = 293^\circ \text{K}$

P_* , ГПа	ΔV_* , м ³ /кг	Δe_* , кДж/кг	ΔS_* , кДж/(кг·град)	dT/dP , град/ГПа
11,6	-6,75	85,8	0,0256	-264
11-11,5	-6,8	-	-	-240

Во второй строке стоят значения из [9].

Нормировочные постоянные S_{0i} , β_i обеспечивают уровень отсчета энтропии и внутренней энергии обеих фаз от соответствующих значений α -фазы при нормальных условиях $P=0$, $T=293^\circ \text{K}$.

На фиг. 1 приведена рассчитанная по уравнениям (2.1) ударная адиабата в сравнении с экспериментом (сплошная линия — расчет, темные точки соответствуют результатам из [7], а светлые точки — из [11]).

Для расчета ударной адиабаты ϵ -фазы использованы начальные условия α -фазы.

3. Для численного решения сформулированной в п. 1 задачи была использована двухшаговая разностная схема [5]:

$$U_j^{o(n+1)} = U_j^n - \Delta t \frac{F_{j+1}^n - F_j^n}{\Delta r} \quad (3.1)$$

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2} \left\{ U_j^n + U_j^{o(n+1)} - \Delta t \frac{F_j^{o(n+1)} - F_{j-1}^{o(n+1)}}{\Delta r} \right\}$$

Условием устойчивости этой схемы является обычное условие Куранта, в котором для упругопластической модели под скоростью звука следует понимать величину $c = (\partial P / \partial \rho + 4\mu / (3\rho))^{1/2}$.

Для сглаживания нефизических осцилляций, возникающих за фронтом ударной волны и характерных для схем типа Лакса — Вендроффа, был применен метод коррекции потоков [6]. Суть его заключается в коррекции разностного уравнения неразрывности. Считая, что поле течения

известно в каждый момент времени, вводятся диффузионные потоки

$$f_{j+1/2}^n = \eta(\rho_{j+1}^n - \rho_j^n) \quad (3.2)$$

Используя первое уравнение из (3.1), вычисляются значения $\rho_j^{(n+1)} = 1/V_j^{n+1}$ из второго уравнения (3.1) и затем вводятся антидиффузионные потоки

$$f_{j+1/2}^{n+1} = \eta(\rho_{j+1}^{(n+1)} - \rho_j^{(n+1)}) \quad (3.3)$$

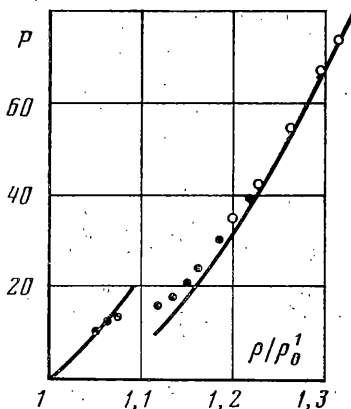
которые ограничиваются следующим образом:

$$s = \text{sign}(f_{j+1/2}^{n+1}), \quad f_{j+1/2}^c = \\ = s \cdot \max\{0, \min[s \cdot \Delta_{j-1/2}, |f_{j+1/2}^{n+1}|, s \cdot \Delta_{j+1/2}]\} \\ \Delta_{j+1/2} = \rho_{j+1}^c - \rho_j^c, \quad \rho_j^c = \rho_j^{(n+1)} + \\ + f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n \quad (3.4)$$

Окончательное выражение для плотности

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^c - f_{j+1/2}^c + f_{j-1/2}^c.$$

Фиг. 1



Постоянная η в (3.2) и (3.3) выбирается из соображений положительности для плотности ρ [6].

Решение нелинейной системы (1.4) осуществляется на каждом шаге по времени путем сведения ее при помощи уравнений (2.1) к одному нелинейному уравнению, которое в силу ограниченности интервала поиска корня эффективно решается методом деления отрезка пополам.

4. Сформулированная выше задача численно решена на ЭВМ при следующих значениях постоянных: $L=7$ кДж/кг [12], $U_0=132500$ кДж/моль, $\mu=90,6$ ГПа, $\sigma_s=0,67$ ГПа [2].

Для уточнения констант уравнений состояния и кинетики фазовых переходов была проведена серия расчетов для различных скоростей соударения бойка с преградой. Результаты расчетов представлены в табл. 2, в которой в первой строке

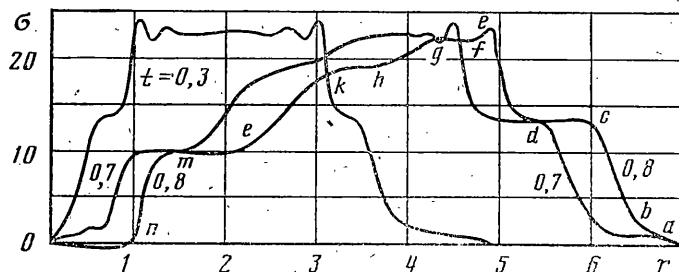
Таблица 2

u_0	σ_2	ρ_0/ρ	c_1
671,4	13,2	0,9316	—
675	12,9	0,931	—
997	17,3	0,8811	3150
1000	17,4	0,879	3000
1150	20,4	0,8697	3720
1150	20,3	0,867	3600
1247	22,6	0,8633	4080
1250	22,4	0,862	4000
1900	39,6	0,8208	5290
1900	39,6	0,821	5100

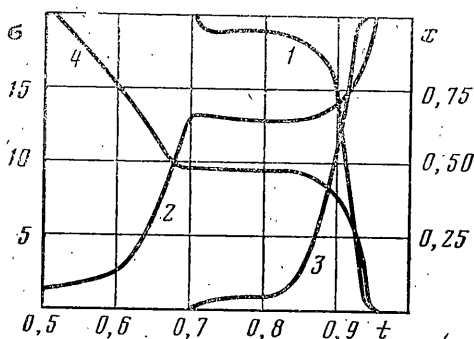
приведены экспериментальные данные [7], во второй — результаты расчетов (σ_2 [ГПа] — напряжение за фронтом второй ударной волны; c_1 [м/с] — лагранжева скорость второй ударной волны).

Все последующее обсуждение результатов проводится для скорости соударения $u_0=1250$ м/с, длина ударника — 2 мм, преграды — 5 мм.

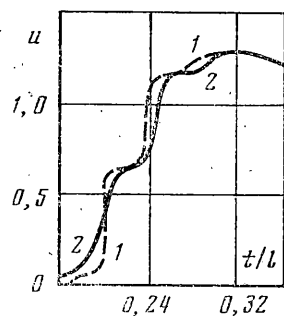
Расчетные профили волн напряжения представлены на фиг. 2. Характерные участки профиля волны напряжения в момент времени $t=0,8$ мкс на фиг. 2 отмечены буквами: ab — упругий предвестник, bcd — первая пластическая волна, на фронте которой образуются и активируются предзародыши ϵ -фазы. При значении $\sigma \approx 13,0$ ГПа около 4% вещества переходит в ϵ -фазу (фиг. 3). Эта ситуация сохраняется до тех пор, пока давление не превысит пороговое и переход α -фазы в ϵ -фазу происходит во второй пластической волне (участок de , фиг. 2). Это соответствует принятому мнению [1] о мартенситной перестройке кристаллической решетки. В обла-



Фиг. 2



Фиг. 3



Фиг. 4

сти 20 ГПа весь материал оказывается в ϵ -фазе. Характерное время, соответствующее лавинообразному переходу из α -фазы с 4%-ным содержанием зародышей ϵ -фазы и при обратном переходе из ϵ -фазы с 4%-ным содержанием зародышей α -фазы, составляет $t_* = 0,10 - 0,11$ мкс, полное время с момента активации зародышей доходит до $t \approx 0,2$ мкс, что соответствует [7, 13].

Всплеск ef является счетной особенностью для схем типа Лакса — Вендроффа. Упругая gh и пластическая волны разрежения kl движутся с различными скоростями, вследствие чего образуется площадка kh , за которой снятие нагрузки осуществляется пластической волной разрежения и ϵ -фаза переводится в неравновесное состояние. В ударной волне разрежения mn происходит переход в исходную α -фазу, полностью заканчивающийся при $\sigma = 5,0$ ГПа, что согласуется с данными [2], по которым процесс образования α -фазы заканчивается при $\sigma = 5,5$ ГПа. Пороговое значение обратного перехода (площадка ml , фиг. 2) $\sigma = 9,7$ ГПа. Отметим, что характерное время прямого и обратного переходов совпадают между собой. Этот результат подтверждается экспериментом [7].

На фиг. 2, 3 отчетливо прослеживается гистерезис превращения, отмеченный в [7, 13].

Кривые 1, 3 и 2, 4 на фиг. 3 изображают изменение концентрации и напряжения в точке материала с течением времени при прямом и обратном переходах соответственно.

В процессе счета профиль ударной волны размывается на конечное число счетных интервалов (обычно на 2–3 шага по пространству). В силу этой причины отражение профиля от свободной поверхности мишени происходит не мгновенно и крутизна профиля скорости свободной поверхности оказывается более пологой, чем экспериментальная (фиг. 4, кривая 1, обозначенная пунктиром, — эксперимент из [7], кривая 2 — расчет, в котором ударник и мишень имеют одинаковые размеры по 3,5 мм, $u_0 = 1292$ м/с).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Альтшулер Л. В.* Фазовые превращения в ударных волнах обзор.— ПМТФ, 1978, № 4, с. 93—103.
2. *Duvall G. E., Graham R. A.* Phase transitions under shock wave loading.— *Revs Mod. Phys.*, 1977, v. 49, No. 3, p. 523—579.
3. *Низматулин Р. И.* Методы механики сплошной среды для описания многофазных смесей.— ПММ, 1970, т. 34, № 6, с. 1097—1112.
4. *Ахмадеев Н. Х., Низматулин Р. И.* Ударные волны и фазовые превращения в железе.— ПМТФ, 1976, № 5, с. 128—135.
5. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 377 с.
6. *Book D. L., Boris J. P., Hain K.* Flux-Corrected Transport II: Generalizations of the Method.— *J. Appl. Phys.*, 1975, v. 18, p. 248—283.
7. *Barker L. M., Hollenbach R. E.* Shock-wave study of the $\alpha \rightleftharpoons \epsilon$ -phase transitions in iron.— *J. Appl. Phys.* 1974, v. 45, No. 11, p. 4872—4887.
8. *Любов Б. Я.* Кинетическая теория фазовых превращений. М.: Metallurgy, 1969. 263 с.
9. *Тонков Е. Ю.* Фазовые диаграммы элементов при высоких давлениях. М.: Наука, 1979, с. 115—119.
10. *Альтшулер Л. В., Чекин Б. С.* Релаксационные параметры за фронтом ударных волн.— В кн.: Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах. Черногоровка, 1978, с. 87—90.
11. *Альтшулер Л. В., Баканова А. А., Дудолов И. П., Дынин Е. А., Трунин Р. Ф., Чекин Б. С.* Ударные адиабаты металлов. Новые данные, статистический анализ и общие закономерности.— ПМТФ, 1981, № 2, с. 3—34.
12. *Жданов В. А., Конусов В. Ф., Жуков А. В.* Характеристические скорости соударения твердых тел.— *Иzv. вузов. Физика*, 1973, вып. 1, с. 127—128.
13. *Ананьин А. В., Дремин А. Н., Канель Г. И.* Структура ударных волн и волн разрежения в железе.— *Физика горения и взрыва*, 1973, т. 9, № 3, с. 437.

Томск

Поступила в редакцию
7.II.1983