

УДК 518.12:539.3

## МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ КИНЕТИКИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

В. А. Быченков, Н. С. Жилиева, Г. В. Коваленко, И. И. Кузнецова,  
А. В. Петровцев, А. Т. Сапожников, Н. Д. Стринадкина, Л. В. Хардина  
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Расчет кинетики фазовых превращений проводится в предположении механического и температурного равновесия компонентов смеси. При деформировании материала может осуществляться одновременно несколько фазовых превращений. Определение термодинамических параметров компонентов смеси основывается на решении линеаризованных уравнений для приращений давления и температуры компонентов при известных приращениях удельных объема и энергии смеси. Предлагается эффективный алгоритм решения этих уравнений на базе явной лагранжевой разностной схемы, учитывающий невязки по давлению и температуре. Методика реализована в двумерной программе СПРУТ. В работе представлены результаты расчетов одномерной и двумерной задач с учетом и без учета  $(\alpha - \varepsilon)$ -превращения в железе.

### Введение

В настоящее время возможности ЭВМ позволяют осуществлять математическое моделирование динамических процессов в условиях релаксации как сдвиговых, так и средних напряжений. Авторы хотят сделать очередной шаг по изучению свойств материалов и созданию соответствующих моделей их поведения.

Релаксационная модель сдвиговых напряжений была создана и реализована ранее в двумерной программе СПРУТ [1, 2]. Релаксационная модель для давления и температуры в условиях фазовых превращений была реализована [3] в РФЯЦ-ВНИИТФ в одномерной программе ВОЛНА [4]. При этом предполагалось, что давления и температуры фаз одинаковы, т. е. для описания смеси применялась модель термомеханически-равновесной смеси. Ставилась задача реализации такой же модели в рамках двумерной лагранжевой программы СПРУТ.

Необходимо было также существенно повысить эффективность алгоритма решения уравнений смеси в условиях равенства давлений и температур компонентов. Проблема связана с присутствием в системе  $2N$  нелинейных уравнений состояния для  $N$  компонентов смеси и необходимостью использования пространственных сеток размером порядка  $10^{-2}$  мм. В двумерном случае алгоритм решения уравнений смеси должен быть предельно экономичным.

Предлагается решать задачу определения термодинамического состояния смеси на основе линеаризованных уравнений для приращений значений компонентов с использованием данных на предыдущем шаге по времени. Идейно близкий подход ранее был рассмотрен в [5].

### Математическая модель кинетики фазовых превращений

В смеси фаз принимаются традиционные усреднения удельных объема  $V$  и внутренней энергии  $E$  по массовым концентрациям  $\xi_i$  компонентов:

$$V = \sum_i V_i \xi_i; \quad E = \sum_i E_i \xi_i.$$

Модуль сдвига  $\mu$  и предел текучести  $Y$  смеси определяется усреднением по объемным концентрациям  $\beta_i$  компонентов:

$$\mu = \sum_i \mu_i \beta_i; \quad Y = \sum_i Y_i \beta_i.$$

Девиаторные составляющие тензора напряжений и прочность на разрыв компонентов смеси полагаются одинаковыми. Это предложение вполне оправданно, так как при полиморфных переходах механические свойства фаз, как правило, весьма близки (если объемный эффект фазового перехода невелик). В случае учета кинетики релаксации сдвиговых или растягивающих напряжений всем компонентам смеси приписываются средние значения констант кинетических уравнений в методике СПРУТ [2].

Каждой фазе ставится в соответствие набор параметров модели среды и уравнение состояния (УРС), которое используется в форме зависимостей давления и температуры от плотности  $\rho$  и удельной внутренней энергии  $E$ :

$$P_i = P_i(\rho_i, E_i); \quad T_i = T_i(\rho_i, E_i).$$

Моделирование поведения смеси рассматривается в предположении равенства давлений и температур компонентов:

$$P = P_i; \quad T = T_i.$$

Применение этой модели смеси оправданно следующими причинами. В динамических процессах образуется большое число зародышей новой фазы, что определяет малость размеров частиц фаз вплоть до окончания фазового перехода. Это обеспечивает малое время выравнивания давлений и температур частиц в смеси. При фазовом переходе в отличие от обычной гетерогенной смеси есть обмен массой между частицами разных фаз. Это тоже уменьшает время установления термомеханического равновесия. Важным преимуществом модели термомеханически-равновесной смеси является ее простота, поскольку для замыкания соответствующей системы уравнений требуются только УРСы фаз.

Моделирование кинетики фазовых превращений осуществляется в рамках подхода, предложенного в [3, 6]. Он основан на кинетических уравнениях релаксационного типа [7–9].

Для каждой фазы задаются:

- 1) области стабильности в плоскости  $(P, T)$  переменных (в табличном виде);
- 2) список превращений (фаз), которые могут приводить к наработке данной фазы;
- 3) кинетика превращения в данную фазу  $i$  из фаз  $j$ , разрешенных списком превращений:

$$\frac{d\xi_{j,i}}{dt} = \frac{\xi_{ji}(\Delta\Phi_{ji}) - \xi_i}{t_{ji}(\Delta\Phi_{ji})} \geq 0, \quad (1)$$

где  $\Delta\Phi_{ji} = \Phi_j(P, T) - \Phi_i(P, T) \geq 0$  — разность потенциалов Гиббса фаз;  $\xi_{ji}(\Delta\Phi_{ji})$ ,  $t_{ji}(\Delta\Phi_{ji})$  — табличные зависимости;  $t$  — время.

Реализация модели кинетики фазовых превращений осуществлена в программе СПРУТ на базе явной лагранжевой разностной схемы на регулярных четырехугольных пространственных сетках в счетных областях [1].

В управляющей подпрограмме расчета термодинамики ячейки определяются приращения удельных объемов среды, вещества и удельной внутренней энергии на временном шаге.

Приращение удельной внутренней энергии рассчитывается за две итерации. В обеих итерациях остается неизменным вклад искусственной вязкости. Вклад работы давления и девиатора тензора напряжений в приращение удельной внутренней энергии рассчитывается сначала на основе значений компонентов тензора напряжений на момент времени  $t^n$ . Выполняется обращение к модулю расчета термодинамических параметров компонентов смеси, в результате чего получается первое приближение давления и температуры на момент времени  $t^{n+1}$ . Эти значения используются на второй итерации по определению приращения на временном шаге удельной внутренней энергии. Наконец, осуществляется второе обращение к модулю расчета термодинамического состояния смеси. В результате получаем также ограничение на временной шаг схемы, определяемый условием точности решения уравнений кинетики и условием устойчивости.

Модуль расчета термодинамического состояния начинает свою работу с определения стабильности состояния  $(P, T)^n$ .

Если состояние  $(P, T)^n$  не принадлежит областям стабильности ни одной из фаз, имеющих на момент времени  $t^n$ , то организуется смесь фаз с включением новой фазы, которая стабильна в точке  $(P, T)^n$ . Новой фазе  $i$  ставится в соответствие значение массовой концентрации  $\xi_i = 10^{-6}$ , а у фазы  $j$ , отвечающей области стабильности на предыдущем временном шаге, значение массовой концентрации уменьшается на  $10^{-6}$ . При этом итерационным путем определяется термодинамическое состояние смеси на момент времени  $t^n$  (алгоритм представлен ниже).

Если состояние  $(P, T)^n$  отвечает области стабильности одной из фаз на момент  $t^n$  и имеется несколько компонентов смеси, то сначала определяются значения массовых концентраций компонентов на момент  $t^{n+1}$  решением разностного аналога кинетического уравнения (1), а затем решается линеаризованная система уравнений, выражающих равенство давлений и температур компонентов смеси или их приращений на временном шаге.

### Алгоритм определения термодинамических параметров компонентов смеси в условиях механического и температурного равновесия

Считаем, что девиаторные составляющие тензора напряжений компонентов смеси равны и определяются из уравнений Прандтля—Рейса с усредненными по объемным концентрациям значениями модулей сдвига и пределов текучести компонентов. Тогда задача состоит в определении  $(P_i, V_i, T_i, E_i)^{n+1}$  по известным значениям  $\xi_i^{n+1}$ ,  $(\xi_i, P_i, V_i, T_i, E_i)^n$  на временном шаге  $t^n$  и средним для смеси значениям  $V^n, E^n, V^{n+1}, E^{n+1}$ , где  $i$  — индекс компонента смеси. Далее временной индекс  $n$  будем опускать.

Будем рассматривать УРСы компонентов смеси в форме зависимостей

$$P_i = P_i(\rho_i, E_i); \quad T_i = T_i(\rho_i, E_i).$$

Если использовать УРСы в форме  $P_i = P_i(\rho_i, T_i)$ ,  $E_i = E_i(\rho_i, T_i)$ , то суть алгоритма не изменится. В [10] показано, что если компоненты смеси термодинамически устойчивы, т. е. в них  $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T < 0$  и  $P \rightarrow +\infty$  при  $T = \text{const}$  и  $V \rightarrow 0$ , то решение системы уравнений термодинамического равновесия существует и единственно, при этом смесь является термомеханически устойчивой. В таком случае система уравнений динамики смеси является гиперболической и задача с начальными данными корректна.

Опишем сначала алгоритм для смеси из двух компонентов ( $i = 1, 2$ ).

Запишем систему линеаризованных уравнений, выражающих равенство приращений давлений и температур и учитывающих невязки  $\Delta P_{12} = P_1 - P_2$ ,  $\Delta T_{12} = T_1 - T_2$  на момент времени  $t^n$ . Обозначим  $P_{Vi} = \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_i^n$ ;  $P_{Ei} = \left(\frac{\partial P}{\partial E}\right)_i^n$ ;  $T_{Vi} = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_i^n$ ;  $T_{Ei} = \left(\frac{\partial T}{\partial E}\right)_i^n$ . Имеем четыре линейных уравнения относительно  $\Delta V_i = V_i^{n+1} - V_i$ ,  $\Delta E_i = E_i^{n+1} - E_i$ :

$$\begin{aligned} P_{V1}\Delta V_1 + P_{E1}\Delta E_1 - P_{V2}\Delta V_2 - P_{E2}\Delta E_2 + \delta P_{12} &= 0; \\ T_{V1}\Delta V_1 + T_{E1}\Delta E_1 - T_{V2}\Delta V_2 - T_{E2}\Delta E_2 + \delta T_{12} &= 0; \\ (V_1 + \Delta V_1)\xi_1^{n+1} + (V_2 + \Delta V_2)\xi_2^{n+1} &= V + \Delta V; \\ (E_1 + \Delta E_1)\xi_1^{n+1} + (E_2 + \Delta E_2)\xi_2^{n+1} &= E + \Delta E. \end{aligned} \tag{2}$$

Если  $\delta P_{12} = 0$ ,  $\delta T_{12} = 0$ , то система (2) — следствие условий равенства приращений давлений и температур на временном шаге, если же  $\delta P_{12} = \Delta P_{12}$ ,  $\delta T_{12} = \Delta T_{12}$  — равенства давлений и температур.

Значения невязок  $\delta P_{12}$ ,  $\delta T_{12}$  будем определять из следующих условий:

$$1) \delta V_1 \xi_1^{n+1} + \delta V_2 \xi_2^{n+1} = 0; \quad \delta E_1 \xi_1^{n+1} + \delta E_2 \xi_2^{n+1} = 0,$$

отвечающих последним двум уравнениям системы (2) для  $\delta V = \delta E = 0$ ;

2) естественных ограничений

$$|\delta P_{12}| \leq |\Delta P_{12}|; \quad |\delta T_{12}| \leq |\Delta T_{12}|; \quad |\delta V_i| \leq \Delta V; \quad |\delta E_i| \leq \Delta E;$$

3) равенства нулю невязки по  $V$  либо невязки по  $E$ .

Последнее условие позволяет простым способом получить решение аналога системы (2) для невязок  $\delta V_i$ ,  $\delta E_i$ , если считать, что  $P_{Vi} < 0$ ;  $T_{Vi} > 0$ ;  $P_{Ei} > 0$ ;  $T_{Ei} > 0$ . Для веществ, нормальных по Бете—Вейлю, эти условия выполняются.

Следствием принятых условий является следующий алгоритм определения невязок  $\delta P_{12}$ ,  $\delta T_{12}$ :

Если  $\Delta P_{12}\Delta T_{12} > 0$ , то

$$\begin{aligned} \delta P_{12} &= (P_{E1}\xi_2 + P_{E2}\xi_1) |\Delta E| \text{Sign}(P_1 - P_2); \\ \delta T_{12} &= (T_{E1}\xi_2 + T_{E2}\xi_1) |\Delta E| \text{Sign}(P_1 - P_2), \end{aligned}$$

иначе

$$\begin{aligned} \delta P_{12} &= (P_{V1}\xi_2 + P_{V2}\xi_1) |\Delta V| \text{Sign}(P_2 - P_1); \\ \delta T_{12} &= (T_{V1}\xi_2 + T_{V2}\xi_1) |\Delta V| \text{Sign}(P_2 - P_1). \end{aligned}$$

$\chi = 1$ .

Если  $|\delta P_{12}| > |\Delta P_{12}|$ , то  $\chi = |\Delta P_{12}| / |\delta P_{12}|$ .

Если  $\chi |\delta T_{12}| > |\Delta T_{12}|$ , то  $\chi = |\Delta T_{12}| / (\chi |\delta T_{12}|)$ .

$\delta P_{12} = \chi \delta P_{12}$ ;  $\delta T_{12} = \chi \delta T_{12}$ .

Система уравнений (2) приводится к двум линейным уравнениям относительно  $\Delta V_1$ ,  $\Delta E_1$ .

В случае  $N$  ( $N > 2$ ) компонентов смеси число уравнений в аналоге системы (2) увеличивается на 2 для каждого дополнительного компонента. При этом система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} P_{Vi}\Delta V_i + P_{Ei}\Delta E_i - P_{Vj}\Delta V_j - P_{Ej}\Delta E_j + \delta P_{ij} &= 0, \quad i = 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, N, \quad i \neq j; \\ T_{Vi}\Delta V_i + T_{Ei}\Delta E_i - T_{Vj}\Delta V_j - T_{Ej}\Delta E_j + \delta T_{ij} &= 0, \quad i = 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, N, \quad i \neq j; \\ \sum_{k=1}^N (V_k + \Delta V_k) \xi_k^{n+1} &= V + \Delta V; \\ \sum_{k=1}^N (E_k + \Delta E_k) \xi_k^{n+1} &= E + \Delta E. \end{aligned} \quad (3)$$

Невязки  $\delta P_{ij}$ ,  $\delta T_{ij}$  полагаются равными нулю для всех пар  $(i, j)$ , за исключением одной пары компонентов  $(l, k)$ , для которой

$$|\Delta P_{lk}| + \frac{|P|}{T} |\Delta T_{lk}| = \max_{i,j} \left( |\Delta P_{ij}| + \frac{|P|}{T} |\Delta T_{ij}| \right), \quad (4)$$

т. е. у которой невязки максимальны.  $P$  и  $T$  в уравнении (4) — средние значения давления и температуры. Они получаются путем усреднения значений давлений компонентов по объемным концентрациям, значений температур компонентов — по массовым концентрациям.

Решение системы линеаризованных уравнений (2) или (3) может приводить к погрешности в новых значениях давлений и температур компонентов выше требуемой точности  $\varepsilon_*$ . В этом случае осуществляется решение системы за  $m$  шагов путем дробления изменений удельного объема  $\Delta V$  и удельной внутренней энергии  $\Delta E$  смеси:

$$\Delta V_0 = \frac{\Delta V}{m}; \quad \Delta E_0 = \frac{\Delta E}{m}.$$

Число шагов определяется из соотношения

$$m = 1 + \text{INT} \left( \max_{i,j} \left( \left| \Delta P_{ij}^{n+1} \right| + \frac{|P^{n+1}|}{T^{n+1}} |\Delta T_{ij}| \right) \frac{1}{\varepsilon_*} \right), \quad (5)$$

причем на  $m$  накладывается ограничение  $m \leq m_{\max}$ .

В ходе решения системы уравнений (2) или (3) на шаге от  $t^n$  до  $t^{n+1}$  возможно получение значений  $\Delta V_i$  таких, что нарушается условие

$$|\Delta V_i| < 0,5V_i. \quad (6)$$

В этом случае решение системы уравнений прекращается, и затем она разрешается за  $m = m_{\max}$  шагов.

Условие (6) не позволяет эффективно использовать стандартные программы решения системы линейных уравнений, т. е. желательно реализовать собственные алгоритмы.

Особо необходимо остановиться на алгоритме определения термодинамических параметров компонентов смеси в момент зарождения новой фазы. Факт ее возникновения устанавливается путем анализа состояния  $(P, T)$  на шаге  $t^n$ . Поскольку такое событие происходит по сравнению с числом временных шагов очень редко, то возможно использование неэкономичных, но достаточно надежных алгоритмов. Например, в случае перехода от однофазного (1) к двухфазному (2) состоянию может быть использован алгоритм, основанный на решении системы уравнений

$$\begin{aligned} \Delta P_{21} &= P_{\rho 2} \Delta \rho_{21} + P_{E 2} \Delta E_{21}; \\ \Delta T_{21} &= T_{\rho 2} \Delta \rho_{21} + T_{E 2} \Delta E_{21} \end{aligned}$$

с начальным приближением

$$\rho_2 = \rho_1; \quad E_2 = E_1$$

и ограничениями

$$-\frac{1}{2}E_2 \leq \Delta E_{21} \leq E_2; \quad -\frac{1}{2}\rho_2 \leq \Delta \rho_{21} \leq \rho_2.$$

Этот алгоритм следующий:

*Начало.* Найдти  $P_2 = P_2(\rho_2, E_2); T_2 = T_2(\rho_2, E_2); T_{\rho 2}, T_{E 2}, P_{\rho 2}, P_{E 2}$ .  
 Если  $|P_2 - P_1| > \varepsilon$  или  $|T_2 - T_1| > \varepsilon$ , то  
 $\Delta \rho_{21} = \Delta P_{21} T_{E 2} - \Delta T_{21} P_{E 2}; \quad Z_{\rho} = P_{\rho 2} T_{E 2} - T_{\rho 2} P_{E 2};$   
 $\Delta E_{21} = \Delta P_{21} T_{\rho 2} - \Delta T_{21} P_{\rho 2}; \quad Z_E = P_{E 2} T_{\rho 2} - P_{\rho 2} T_{E 2};$   
 если  $\Delta E_{21} > E_2 Z_E$ , то  
 $\Delta E_{21} = E_2,$   
 иначе  
 если  $\Delta E_{21} < -0,5 E_2 Z_E$ , то  
 $\Delta E_{21} = -0,5 E_2,$   
 иначе  
 $\Delta E_{21} = \Delta E_{21} / Z_E;$   
 если  $\Delta \rho_{21} > \rho_2 Z_{\rho}$ , то  
 $\Delta \rho_{21} = \rho_2,$   
 иначе  
 если  $\Delta \rho_{21} < -0,5 \rho_2 Z_{\rho}$ , то  
 $\Delta \rho_{21} = -0,5 \rho_2,$   
 иначе  
 $\Delta \rho_{21} = \Delta \rho_{21} / Z_{\rho};$   
 $\rho_2 = \rho_2 + \Delta \rho_{21};$   
 $E_2 = E_2 + \Delta E_{21};$   
 идти на начало.

*Конец.*

## Результаты расчетов

**Плоская одномерная задача.** Рассчитывалось движение одномерной плоской волны в железе, порождаемой действием прилагаемого слева давления, равного 25 ГПа. В железе допускался фазовый переход из исходной  $\alpha$ -фазы в  $\varepsilon$ -фазу. Начальное состояние железа:  $P = 0$ ;  $T = 300$  К;  $\rho = 7,8738094$  г/см<sup>3</sup>;  $E = 0,152328$  кДж/г. УРСы фаз железа были взяты по [11]. Табличные данные для кинетических уравнений подобраны в [6]. Расчеты проводились в гидродинамическом приближении. Далее принимаются следующие размерности величин: расстояние — см; температура — 10<sup>3</sup> К; время — 10<sup>-5</sup> с; скорость — км/с; давление — ГПа; плотность — г/см<sup>3</sup>; удельная внутренняя энергия — кДж/г.

Предельное число дробных шагов  $m_{\max} = 100$ . Допускаемая погрешность при определении термодинамических параметров компонентов смеси принималась равной  $\varepsilon_* = 10^{-3}$ . Шаг по времени  $\tau$  ограничивался условием точности решения кинетического уравнения:  $\left| \frac{d\xi}{dt} \right| \tau \leq 0,025$ . Сетка по пространству имела шаг  $h = 0,005$  см в направлении движения.

В первом расчете тестировался алгоритм определения термодинамических параметров компонентов смеси при первом фазовом переходе в задаче. Ему отвечали следующие параметры состояния на момент времени  $t^n$ :

$$\begin{aligned} V_1^n &= 0,115012; & V_2^n &= 0,110346; & T_1^n &= 0,536382; & T_2^n &= 0,536294; \\ E_1^n &= 0,349165; & E_2^n &= 0,407536; & P_1^n &= 21,124121; & P_2^n &= 21,123192. \end{aligned}$$

При этом приращения удельных объема и внутренней энергии смеси на шаге равнялись

$$\Delta V = -0,00166695; \quad \Delta E = 0,045218.$$

Первое приближение при решении системы уравнений (2) оказалось следующим:

$$P_1^{n+1} = 24,828; \quad P_2^{n+1} = 24,802; \quad T_1^{n+1} = 0,5616; \quad T_2^{n+1} = 0,5616.$$

В соответствии с соотношением (5) число дробных шагов оказалось равным  $m = 27$ . В результате решения системы уравнений (2) за 27 шагов были определены следующие значения параметров состояния:

$$P_1^{n+1} = 24,828870; \quad P_2^{n+1} = 24,828824; \quad T_1^{n+1} = 0,561697; \quad T_2^{n+1} = 0,561659,$$

т. е.

$$|\Delta P_{12}^{n+1}| \approx 4,6 \cdot 10^{-5} < 0,05\varepsilon_*; \quad |\Delta T_{12}^{n+1}| \approx 3,8 \cdot 10^{-5} < 0,04\varepsilon_*$$

и, следовательно, можно было бы увеличить на порядок величину  $\varepsilon_*$  и уменьшить до четырех число дробных шагов.

Во втором расчете (в аналогичной постановке) невязки  $\delta P_{12}$  и  $\delta T_{12}$  полагались равными нулю. Это привело к значительному увеличению погрешности расчета давления:

$$|\Delta P_{12}^{n+1}| \approx 1,94 \cdot 10^{-3} > 1,9\varepsilon_*; \quad |\Delta T_{12}^{n+1}| \approx 5 \cdot 10^{-5}.$$

Результаты расчетов одномерной задачи по программе СПРУТ на пространственной сетке с шагами  $h = 0,005$  и  $h = 0,0005$  см сравнивались с результатами двух расчетов по программе ВОЛНА, выполненных на сетке с шагом  $h = 0,005$ . Первый расчет по программе ВОЛНА выполнялся с выделением точного фронта первой волны (в виде математического разрыва на пространственной сетке), второй — без него, т. е. так же, как в расчете по программе СПРУТ. В первом расчете по программе ВОЛНА точный фронт соответствует волне фазового предвестника, в которой фазовый переход еще не происходит.

На рис. 1—3 показаны результаты этих четырех расчетов в виде зависимостей давления, массовой скорости и массовой концентрации  $\varepsilon$ -фазы от координаты железного образца на два момента времени. Пространственные зависимости, полученные по программе СПРУТ, лежат между двумя

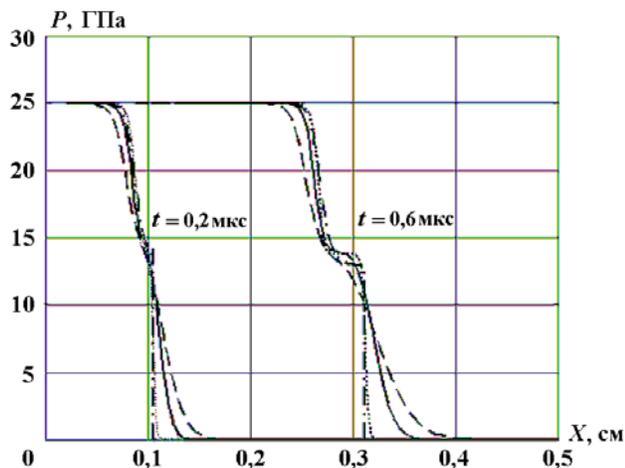


Рис. 1. Расчетные зависимости давления от координаты железного образца: — — по программе СПРУТ на сетке с шагом  $h = 0,005$  см;  $\cdots$  — по программе СПРУТ на сетке с шагом  $h = 0,0005$  см; - - - — по программе ВОЛНА, решение с размазанным фронтом волны; - · - — по программе ВОЛНА, решение с точным фронтом волны

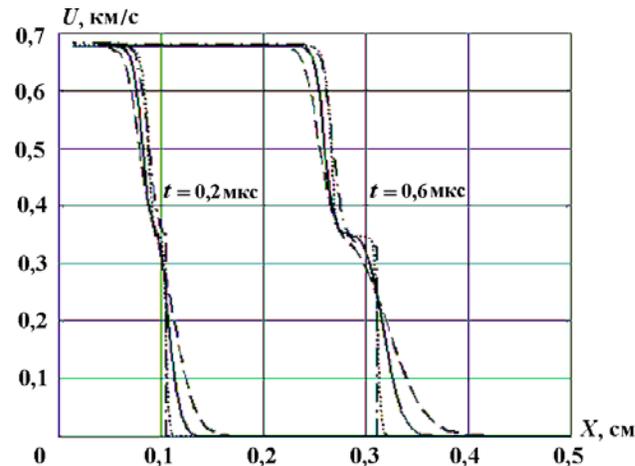


Рис. 2. Расчетные зависимости массовой скорости от координаты железного образца: — — по программе СПРУТ на сетке с шагом  $h = 0,005$  см;  $\cdots$  — по программе СПРУТ на сетке с шагом  $h = 0,0005$  см; - - - — по программе ВОЛНА, решение с размазанным фронтом волны; - · - — по программе ВОЛНА, решение с точным фронтом волны

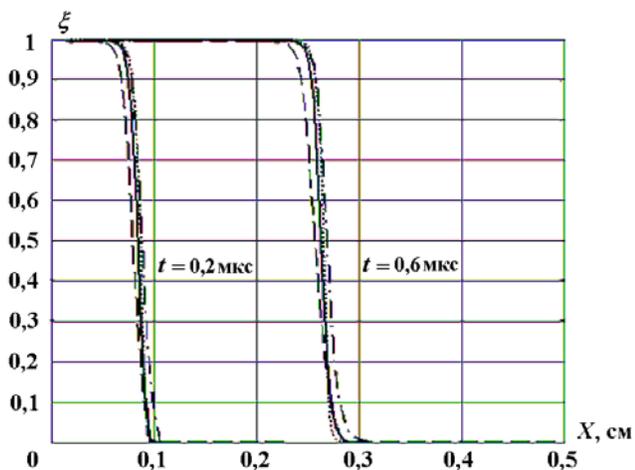


Рис. 3. Расчетные зависимости массовой концентрации  $\varepsilon$ -фазы от координаты железного образца: — — по программе СПРУТ на сетке с шагом  $h = 0,005$  см;  $\cdots$  — по программе СПРУТ на сетке с шагом  $h = 0,0005$  см; - - - — по программе ВОЛНА, решение с размазанным фронтом волны; - · - — по программе ВОЛНА, решение с точным фронтом волны

Среднее время расчета на ЭВМ точки на пространственной сетке с шагом  $h = 0,0005$  см (1000 ячеек в направлении движения) составило  $\approx 1,7 \cdot 10^{-4}$  с, т. е. на 15 % меньше, чем в расчете с грубой сеткой. Это снижение связано с меньшей погрешностью первой итерации в алгоритме определения параметров смеси за счет уменьшения временного шага и с уменьшением числа подключенных точек за счет меньшего размазывания фронта волны. Число временных шагов увеличилось не в 10 раз (что имело бы место при решении обычной гидродинамической задачи), а лишь в  $\sim 5,3$  раза, поскольку временной шаг выбирался в основном по условию точности решения кинетического

решениями по программе ВОЛНА, т. е. результатам тестового расчета по программе СПРУТ вполне можно доверять.

Среднее машинное время расчета точки по программе СПРУТ (на пространственной сетке с шагом  $h = 0,005$  см) к моменту времени  $t = 1$  мкс на ЭВМ Pentium-4 составило  $\sim 2 \cdot 10^{-4}$  с (100 ячеек в направлении движения). Аналогичное время расчета точки по программе ВОЛНА (без точного фронта) оказалось равным  $\sim 10^{-3}$  с. При этом нужно иметь в виду два обстоятельства:

- 1) дополнительные затраты машинного времени на расчет термодинамических параметров в алгоритме разностной схемы ВОЛНА по сравнению с алгоритмом СПРУТ;
- 2) дополнительные затраты машинного времени на расчет двумерных уравнений движения в программе СПРУТ по сравнению с расчетом их одномерного аналога в программе ВОЛНА.

уравнения, а не по условию устойчивости. Передний фронт в расчете с более подробной сеткой размазан приблизительно в 5 раз меньше, чем в расчете с грубой сеткой.

**Плоская двумерная задача.** Рассчитывался разгон железной пластины продуктами взрыва при инициировании взрывчатого вещества (ВВ) из точки. Исследовался вопрос о влиянии кинетики фазовых превращений на двумерное течение без учета прочности на разрыв. Задача модельная.

Начальная геометрия рассчитываемой системы представлена на рис. 4. Система окружена с трех сторон неподвижными жесткими стенками.

Продукты взрыва описываются УРСом  $P = A\rho^3$ . Железная пластина разгоняется продуктами взрыва при инициировании ВВ в точке  $X = Y = 0$ . Скорость нормальной детонации — 7,2 км/с, плотность ВВ — 1,6 г/см<sup>3</sup>.

Начальная пространственная сетка в ВВ и железе — прямоугольная: в ВВ  $h_x = h_y = 0,02$  см; в железе  $h_x = 0,005$  см,  $h_y = 0,01$  см.

Были проведены следующие расчеты:

- в гидродинамическом приближении без учета кинетики фазового перехода;
- в упругопластическом приближении без учета кинетики фазового перехода;
- в упругопластическом приближении с учетом  $(\alpha - \varepsilon)$ -превращения в железе.

Цель проведения расчетов состояла в оценке влияния пластического течения и фазового перехода на:

- положение и форму пластины;
- диссипацию кинетической энергии.

На рис. 5 показано положение железной пластины, полученное в упругопластических расчетах с учетом и без учета кинетики фазового превращения. Учет  $(\alpha - \varepsilon)$ -превращения привел к уменьшению смещения пластины и улучшению ее симметрии.

На рис. 6 в качестве иллюстрации представлена массовая концентрация  $\varepsilon$ -фазы на разные моменты времени после отражения расходящейся цилиндрической волны в ВВ от жесткой стенки. Отражение волны от жесткой стенки в железе приводит к возрастанию амплитуды волны и усилению фазового перехода в окрестности соответствующей границы.

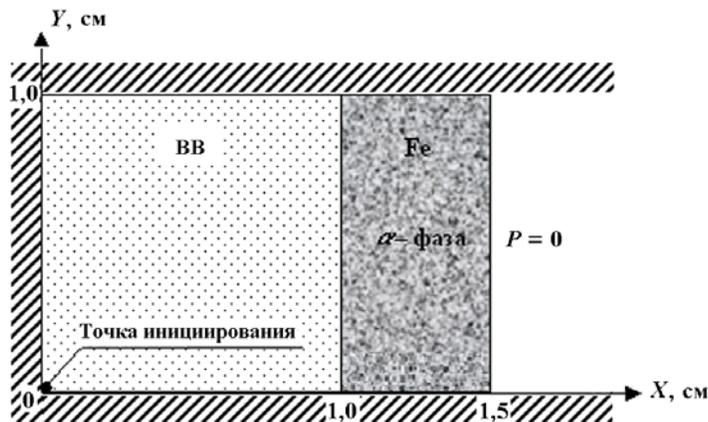


Рис. 4. Начальная геометрия двумерной задачи

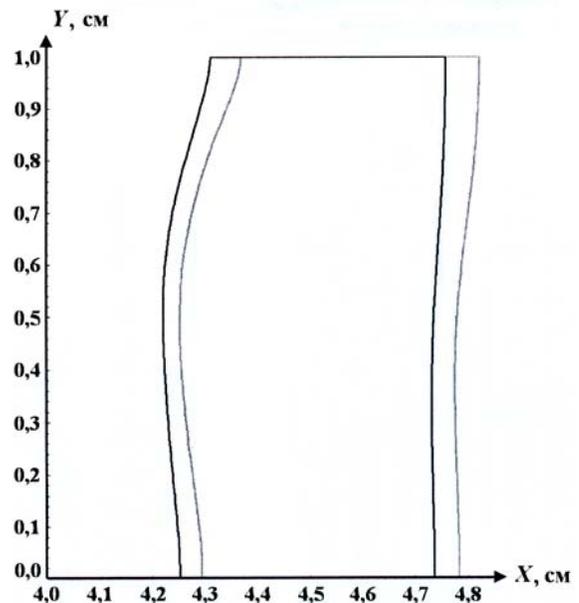


Рис. 5. Рассчитанное положение границ железной пластины с учетом (черный контур) и без учета (серый контур)  $(\alpha - \varepsilon)$ -превращения на момент  $t = 30$  мкс

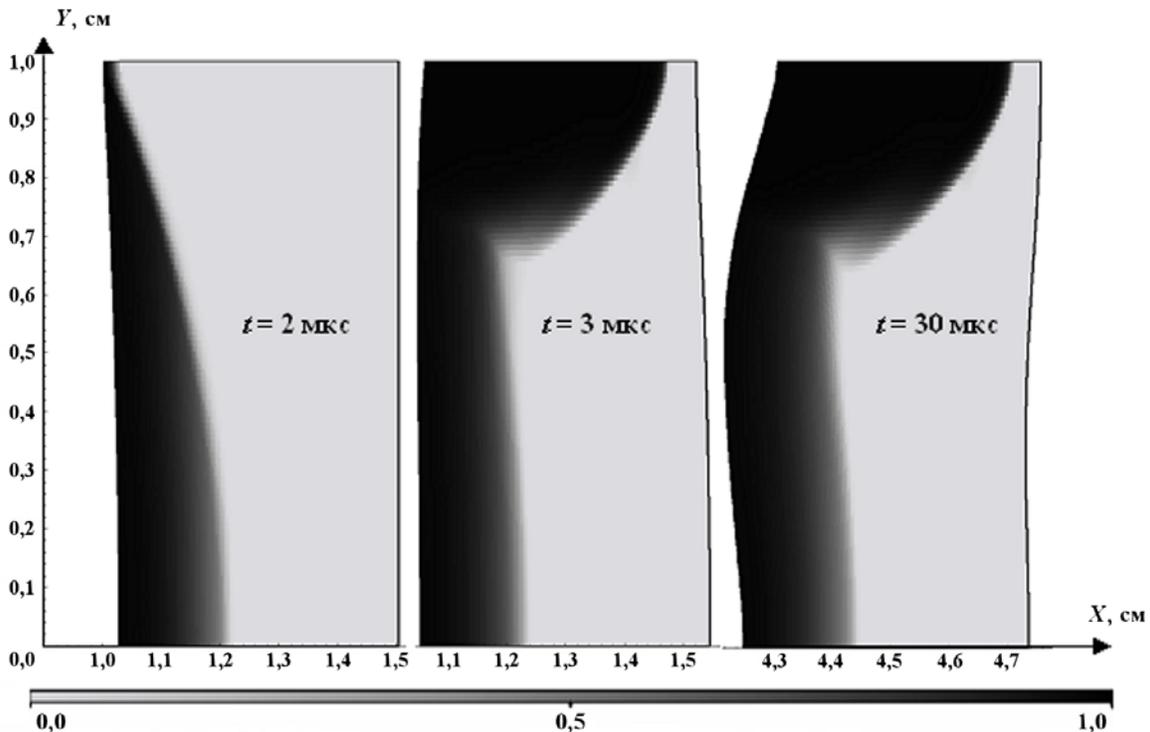


Рис. 6. Массовая концентрация  $\epsilon$ -фазы на различные моменты времени

В табл. 1 представлены значения кинетической энергии железной пластины, полученные при расчетах в разных режимах и на разные моменты времени. Из данных таблицы следует, что при расчетах в упругопластическом режиме происходит уменьшение кинетической энергии, а при учете кинетики фазовых превращений это уменьшение еще более заметно.

По данным табл. 1 получена табл. 2, из которой следует, что уровень диссипации при расчетах с учетом  $(\alpha - \epsilon)$ -превращения значительно выше, чем уровень диссипации на пластических деформациях.

По результатам проведенных расчетов можно сделать следующие выводы:

- фазовое превращение оказывает заметное влияние на положение и форму пластины, разогнанной продуктами взрыва;
- уровень диссипации кинетической энергии на пластических деформациях составляет  $\sim 2,53\%$  на момент времени  $t = 5$  мкс;  $\sim 1,14\%$  на момент времени  $t = 10$  мкс;
- уровень диссипации кинетической энергии за счет фазового превращения составляет  $\sim 4,46\%$  на момент времени  $t = 5$  мкс;  $\sim 3,75\%$  на момент времени  $t = 10$  мкс.

Таблица 1

Кинетическая энергия железной пластины, кДж

Время, мкс	Физический процесс		
	гидродинамический, $\alpha$ -фаза	упругопластический, $\alpha$ -фаза	упругопластический, $(\alpha - \epsilon)$ -превращение
5	1,0561	1,0294	$9,8347 \cdot 10^{-1}$
10	2,7070	2,6762	2,5759
30	—	3,8085	3,7257

Таблица 2

Уровень диссипации кинетической энергии, кДж

Время, мкс	Диссипация	
	на пластических деформациях	за счет фазового перехода
5	0,0267	0,0459
10	0,0308	0,0828

### Заключение

Создана двумерная методика решения уравнений кинетики фазовых превращений. Построен эффективный алгоритм решения уравнений термодинамического состояния смеси в условиях равенства давлений и температур, который позволяет проводить прикладные расчеты за приемлемое время ЭВМ и может быть использован в программах решения задач механики многокомпонентных смесей.

Авторы выражают признательность за помощь в работе П. Д. Герщуку, Е. Е. Мироновой и А. В. Вронскому.

### Список литературы

1. Быченков В. А., Гаджиева В. В. Метод СПРУТ расчета двумерных неустановившихся течений разрушаемых сред // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1978. Вып. 2(2). С. 17–22.
2. Быченков В. А., Куропатенко В. Ф., Хардина Л. В. Математическая модель релаксации напряжений в сплошных и пористых твердых телах // Вестник Челябинского государственного университета. Физика. Сер. 6. 1997. № 1(1). С. 14–26.
3. *Bychenkov V. A., Kovalenko G. V., Petrovtsev A. V.* Numerical simulation of elastic-viscous-plastic properties, polymorphic transformations and spall fracture in iron, in Shock Compression of Condensed Matter-2001 // AIP Conference Proceeding № 620 / Ed. by M. D. Furnish, N. N. Thadhani and Y. Horie. American Institute of Physics, 2002. P. 591–594.
4. Куропатенко В. Ф., Коваленко Г. В., Кузнецова В. И. и др. Комплекс программ ВОЛНА и неоднородный разностный метод расчета движения сжимаемых сред // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1989. Вып. 2. С. 9–25.
5. *Konnegai M.* Two-phase equation of state and free-energy model for dynamic phase change in materials // J. Appl. Phys. 1975. Vol. 46, № 4. P. 1618–1624.
6. *Задорожный Г. А., Коваленко Г. В., Петровцев А. В.* Моделирование полиморфного  $\alpha - \varepsilon$  превращения железа в широком диапазоне состояний // VII Забабахинские науч. чтения. Снежинск, 8–12 сентября 2003 г. С. 183; полный текст: [www.vniitf.ru/rig/kofer/7zst/reports/s5/5-45.pdf](http://www.vniitf.ru/rig/kofer/7zst/reports/s5/5-45.pdf).
7. *Andrews D. J.* Calculation of mixed phases in continuum mechanics // J. Comp. Phys. 1971. Vol. 7. P. 310–326.
8. *Swegle J. W.* Irreversible phase transitions and wave propagation in silicate geologic materials // J. Appl. Phys. 1990. Vol. 68, № 4. P. 1563–1579.
9. *Boettger J. C., Wallace D. C.* Metastability and dynamics of the shock-induced phase transition in iron // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 55. P. 2840–2849.
10. Сапожников А. Т. Существование и единственность решения системы уравнений термодинамического равновесия многокомпонентной гетерогенной смеси // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1996. Вып. 1–2. С. 56–61.
11. *Dremov V. V., Kutepov A. L., Petrovtsev A. V., Sapozhnikov A. T.* Equation of state and phase diagram of iron, in Shock Compression of Condensed Matter-2001 // AIP Conference Proceeding № 620 / Ed. by M. D. Furnish, N. N. Thadhani and Y. Horie. American Institute of Physics, 2002. P. 87–90.

Статья поступила в редакцию 19.07.06.