

УДК 532.593+536.711

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ ПОРИСТОЙ СМЕСИ ПРИ БОЛЬШИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Р. К. Бельхеева

Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск
E-mail: rumia@post.nsu.ru

Единообразно (в форме уравнения Ми — Грюнайзена) представлены уравнения состояния конденсированных компонентов, воздуха, заполняющего поровое пространство, и уравнение состояния смеси. Применимость подобного уравнения состояния для воздуха в области высоких давлений и температур подтверждена путем сравнения рассчитанных с его помощью ударных адиабат и имеющихся в литературе данных. Показано, что предлагаемое уравнение состояния термодинамически равновесной смеси, учитывающее характеристики ее составляющих и их массовые концентрации, достаточно точно описывает поведение пористой среды.

Ключевые слова: уравнение состояния, пористая смесь, ударная адиабата.

Введение. При описании различных смесей методами механики сплошной среды вводится понятие взаимодействующих и взаимопроникающих континуумов. В рамках данной теории каждый континуум представляет собой фазу или компонент смеси и заполняет весь объем. Для каждого из этих континуумов определяются приведенная плотность (масса компонента в единице объема среды), скорость и другие параметры. Смесь в целом характеризуется плотностью и среднemasсовой скоростью.

В общем случае система уравнений движения смеси m компонентов включает m уравнений сохранения массы, m уравнений сохранения импульса, m уравнений сохранения энергии и замыкается m уравнениями состояния, связывающими термодинамические параметры каждого материала, и уравнениями, описывающими условия совместного движения и деформирования фаз.

При распространении сильных ударных волн, вызывающих фазовые переходы в твердом теле, считается, что свойства твердых тел близки к свойствам жидкости, поэтому в качестве условия совместного движения принято использовать условие равенства давлений фаз. В работе [1] предложено несколько способов описания связи между давлением смеси и давлениями ее компонентов. Установлено, что область применимости этих уравнений определяется величиной пористости исследуемого материала. Показано, что для пористого вещества в области высоких давлений и температур наилучшим приближением является широко используемое условие равенства давлений фаз.

В тех случаях, когда смесь находится в термодинамическом равновесии, ее движение можно описать как движение одного континуума с особым уравнением состояния, учитывающим свойства компонентов смеси и их концентрации, что приводит к значительному уменьшению количества уравнений.

В рамках данного метода, рассмотренного в работах [2–5] и др., принято, что уравнения состояния компонентов смеси аналогичны уравнениям для этих веществ в свободном состоянии. В [2] подобное уравнение получено для трехкомпонентной смеси с баротропным

уравнением состояния для компонентов. В [3] найдена зависимость среднего давления твердой фазы от пористости и внутривещного давления при статическом нагружении твердой пористой смеси. В [4] приведено уравнение состояния равновесной смеси калорически совершенного газа и несжимаемого твердого вещества. В [5] предложено уравнение состояния смеси двух конденсированных компонентов в форме уравнения Ми — Грюнайзена. В данной работе развивается модель, предложенная в [5].

Используемые уравнения состояния. Предполагается, что существует ударная адиабата равновесной пористой смеси m компонентов, каждый из которых описывается уравнением состояния в форме Ми — Грюнайзена. Равновесной считается система, для которой выполняются условия $P_i = P$, $T_i = T$, $u_i = u$, где P_i , T_i , u_i — давление, температура, массовая скорость компонента i ; P , T , u — давление, температура и массовая скорость смеси.

Давление твердого вещества в области взрывных нагрузок обычно представляется в виде суммы двух составляющих:

$$P = P_x + P_T$$

(P_x — упругое давление; $P_T = \gamma\rho E_T$ — тепловое давление; γ — коэффициент Грюнайзена; ρ — плотность вещества; E_T — тепловая энергия). Внутренняя энергия также представляется в виде суммы двух составляющих:

$$E = E_x + E_T.$$

Здесь E_x — упругая энергия сжатия:

$$E_x = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{P_x}{\rho^2} d\rho,$$

ρ_0 — плотность в начальный момент времени; $E_T = cT$ — тепловая составляющая внутренней энергии; c — удельная теплоемкость.

Уравнение состояния в форме Ми — Грюнайзена для воздуха. Для единообразного описания пористой смеси и всех ее компонентов уравнение состояния воздуха, находящегося в порах, также представляется в форме уравнения Ми — Грюнайзена. Упругая часть давления записывается в форме Тета:

$$P_{a,x} = A_a[(\rho_a/\rho_{a,0})^{n_a} - 1].$$

Здесь ρ_a , $\rho_{a,0}$ — плотность и начальная плотность воздуха; $A_a = c_{s,0}^2 \rho_{a,0} / n_a$, n_a — константы уравнения; $c_{s,0}$ — скорость звука при нормальных условиях; индекс a соответствует воздуху.

Для обоснования применимости данного уравнения проведены две серии расчетов:

- 1) $A_a = \text{const}$, $c_a = \text{const}$;
- 2) $A_a = \text{const}$, $c_a = c_a(T(P))$.

В случае 2 удельная теплоемкость воздуха c_a в диапазоне давлений и температур, возникающих в ударных волнах, получена следующим образом. В [6] в виде таблицы представлены ударные адиабаты воздуха. Из таблиц, приведенных в работе [7], выбраны значения удельной теплоемкости воздуха для давлений и температур, указанных в [6]. Зависимость c_a от температуры в ударной волне аппроксимируется функцией

$$c_a(T(P)) = a_0 + b_0(T - 300)^2 + c_0(T - 300)^3 \quad (1)$$

и показана на рис. 1. Здесь $a_0 = 0,7176$ кДж/(кг·К); $b_0 = 8 \cdot 10^{-8}$ кДж/(кг·К); $c_0 = 3,8 \cdot 10^{-12}$ кДж/(кг·К). Варьированием γ_a и n_a численно (методом итераций) установлено, что наилучшее согласие ударных адиабат с данными [6] достигается при коэффициенте Грюнайзена для воздуха $\gamma_a = 0,16$ и показателе сжимаемости $n_a = 2,2$. Следует

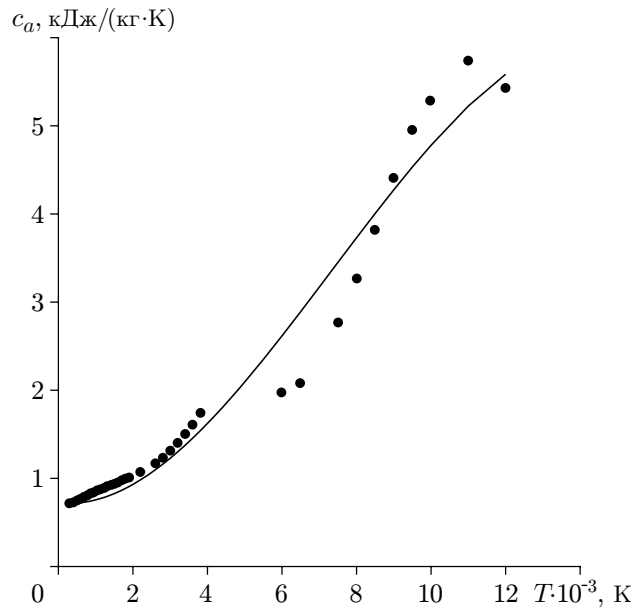


Рис. 1. Зависимость удельной теплоемкости воздуха от температуры в ударной волне:
 точки — данные [7], линия — расчет по формуле (1)

отметить, что в [6] в аналогичном уравнении состояния продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ γ меняется в интервале от $1/5 \div 1/3$ при малой плотности (идеальный газ) до $0,7 \div 1,0$ при плотности продуктов детонации $\rho > 2 \text{ г/см}^3$.

На рис. 2 приведены ударные адиабаты воздуха (в координатах массовая скорость — скорость ударной волны, массовая скорость — давление, плотность — давление), рассчитанные по предлагаемому уравнению состояния, а также данные работы [6]. Лучшего согласия (по сравнению с данными [6]) можно достичь, если показатель n_a с ростом давления варьируется в диапазоне от 2,0 до 3,1 (точки на рис. 2).

На рис. 2 приведена также ударная адиабата воздуха, рассчитанная по уравнению состояния идеального газа $P = \gamma \rho c(T - T_0)$ ($\gamma = 1,4$).

Сравнение ударных адиабат воздуха, рассчитанных по предложенному уравнению состояния, и данных [6] позволяет сделать вывод о применимости уравнения состояния в форме Ми — Грюнайзена для воздуха.

Уравнение состояния пористого вещества. Для получения уравнений состояния пористой меди, пористого графита и пористой смеси графита и меди использованы значения параметров, приведенные в табл. 1. Результаты расчета ударных адиабат сплошных твердых тел с использованием этих параметров хорошо согласуются с ударными адиабатами, полученными в [8–11].

Уравнения состояния компонентов нормируются таким образом, чтобы при нормальных условиях ($P = 0,1 \text{ МПа}$, $T = 300 \text{ К}$) давления и энергии фаз были равны нулю:

$$P = A_i[(\rho_{ii}/\rho_{ii,0})^{n_i} - 1] + \gamma_i \rho_{ii} c_i (T - 300), \quad E = E_{x,i} + c_i (T - 300).$$

Здесь A_i , n_i — константы сжимаемости; ρ_{ii} , $\rho_{ii,0}$ — истинная плотность и истинная начальная плотность; c_i — удельная теплоемкость; γ_i — коэффициент Грюнайзена i -го ком-

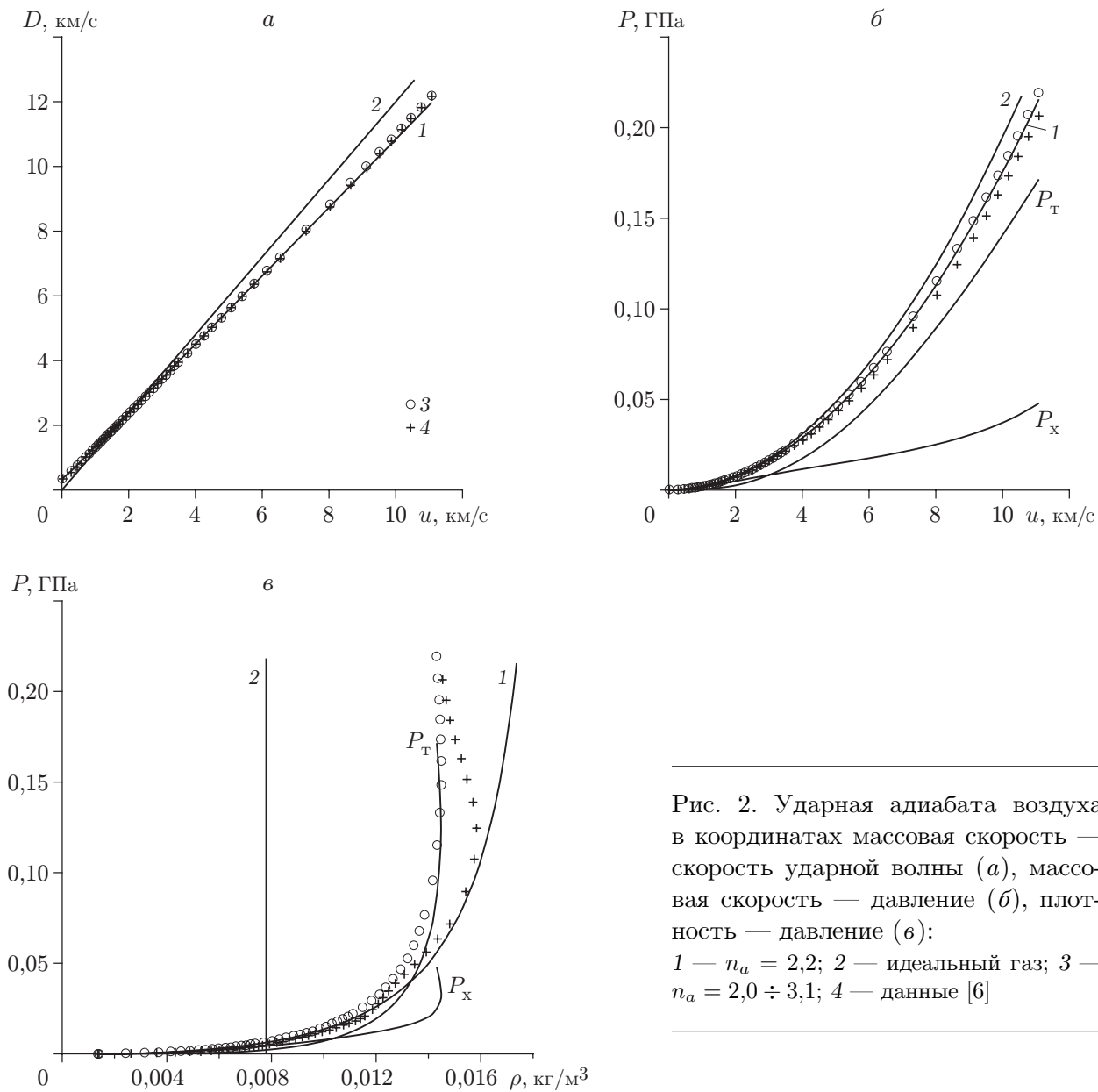


Рис. 2. Ударная адиабата воздуха в координатах массовая скорость — скорость ударной волны (а), массовая скорость — давление (б), плотность — давление (в):

1 — $n_a = 2,2$; 2 — идеальный газ; 3 — $n_a = 2,0 \div 3,1$; 4 — данные [6]

Таблица 1

Параметры уравнений состояния воздуха, меди и графита

Вещество	$\rho_{ii,0}$, кг/м ³	A_i , Па	n_i	c_i , кДж/(кг · К)	γ_i
Воздух	1,3	$0,695 \cdot 10^{-3}$	2,2	0,718	0,16
Медь	$8,93 \cdot 10^3$	$347,5 \cdot 10^8$	4,0	0,382	2,00
Графит	$2,26 \cdot 10^3$	$120,0 \cdot 10^8$	4,0	0,680	2,00

понента. При такой нормировке в случае, когда среда перед фронтом прямой ударной волны покоится, уравнения Гюгионо для равновесной смеси имеют вид

$$\rho_0 D = \rho(D - u), \quad P = \rho_0 D u, \quad E = (P/2)(1/\rho_0 - 1/\rho), \quad (2)$$

где ρ , ρ_0 , u , P , E — плотность, начальная плотность, массовая скорость, давление и энергия среды за фронтом ударной волны; D — скорость фронта ударной волны. Добавив к системе уравнений (2) два уравнения состояния среды

$$P = P(\rho, T), \quad E = E(\rho, T), \quad (3)$$

получим систему пяти уравнений для шести неизвестных. Задавая значение скорости среды за фронтом ударной волны, из системы уравнений (2) и (3) можно определить значения всех ее параметров.

Плотность m -компонентной смеси вычисляется по формуле $1/\rho = \sum_{i=1}^m x_i/\rho_{ii}$, теплоемкость задается формулой $c = \sum_{i=1}^m x_i c_i$, где x_i — массовые концентрации компонентов. Для исследуемой смеси принимается $\gamma = \sum_{i=1}^m x_i \gamma_i$, $n = \sum_{i=1}^m x_i n_i$.

Уравнения состояния (3) имеют вид

$$P = P_x + \gamma \rho E_T, \quad E = E_x + E_T, \quad (4)$$

где

$$P_x = A \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right], \quad E_T = c(T - 300), \quad E_x = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{P_x}{\rho^2} d\rho.$$

Константы A и начальная плотность ρ_0 в уравнении состояния смеси определяются в виде

$$\frac{1}{A} = \sum_i \frac{x_i}{A_i}, \quad \frac{1}{\rho_0} = \sum_i \frac{x_i}{\rho_{ii,0}}. \quad (5)$$

Здесь суммирование ведется по всем компонентам. В [5] предложено несколько способов выражения A через константы A_i и массовые концентрации составляющих. Установлено, что зависимости (5) позволяют с высокой точностью описать поведение смеси конденсированных компонентов при ударно-волновом нагружении в диапазоне низких давлений, а выражения для тех же констант в виде

$$\frac{1}{A} = \sum_{i_c} \frac{x_i}{A_i}, \quad \frac{1}{\rho_0} = \sum_{i_c} \frac{x_i}{\rho_{ii,0}} \quad (5')$$

(суммирование ведется только по конденсированным компонентам) — в диапазоне высоких давлений.

Сначала исследуется влияние пористости на уравнение состояния пористого вещества. Для этого по уравнениям состояния (4), (5) и (4), (5') численно (итерационным методом) рассчитаны ударные адиабаты меди и графита различной пористости (под пористостью \varkappa понимается отношение начальной плотности смеси к плотности монолита того же состава) и проведено сравнение с данными работ [8–11]. Состав исследуемых смесей приведен в табл. 2, 3.

Таблица 2

Пористость и массовая концентрация воздуха в пористой меди	
κ	x_a
0,885	0,000 018 98
0,819	0,000 032 29
0,708	0,000 060 25
0,643	0,000 081 11
0,505	0,000 143 19

Таблица 3

Пористость и массовая концентрация воздуха в пористом графите	
κ	x_a
0,98	0,000 010 94
0,82	0,000 128 90
0,78	0,000 161 00

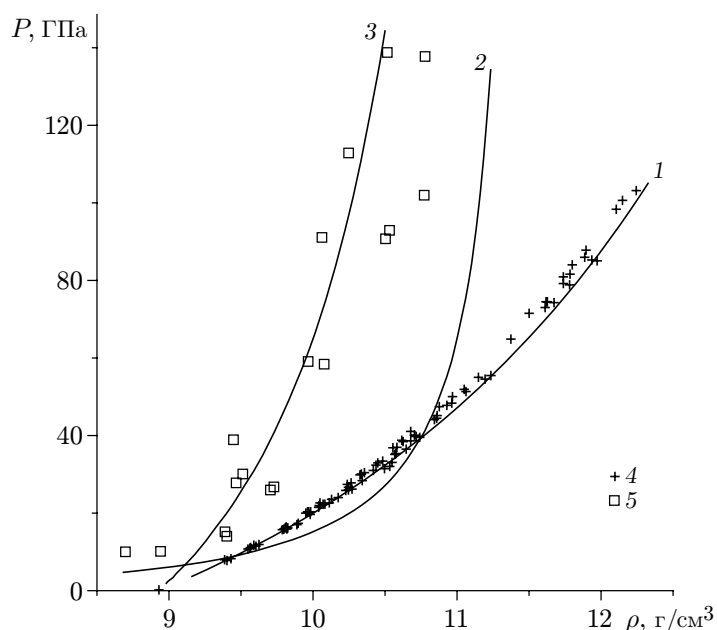


Рис. 3. Ударные адиабаты сплошной (1, 4) и пористой ($\kappa = 0,643$) (2, 3, 5) меди: 2 — расчет по уравнению состояния двухкомпонентной смеси; 3 — расчет по уравнению состояния меди, нагружаемой из начального пористого состояния; 4, 5 — данные [8]

На рис. 3 приведена одна из ударных адиабат пористой меди ($\kappa = 0,643$) в координатах плотность — давление. Ударная адиабата, рассчитанная по уравнению (4), (5) (кривая 2), хорошо согласуется с данными работы [8] в области низких давлений, а ударная адиабата, рассчитанная по уравнению (4), (5') (кривая 3), — в области высоких давлений. Анализ результатов расчетов позволяет сделать следующие выводы: при ударно-волновом нагружении пористого вещества существуют неравновесные участки, соответствующие состояниям вещества до начала процесса затекания пор (кривая 2 в области низких давлений); эти участки описываются уравнением состояния смеси (4), (5). Затем происходит затекание пересжатого сплошного вещества в поры, и “конечная” ударная адиабата описывается уравнением состояния сплошного вещества, нагружаемого из начального пористого состояния.

Уравнение состояния пористой смеси двух конденсированных компонентов. Исследовано влияние пористости на уравнение состояния пористой смеси двух конденсированных компонентов: меди и графита. Так же как и в описанном выше случае, по уравнению состояния (4), (5') рассчитываются ударные адиабаты смесей с различной концентрацией меди, графита и воздуха и проводится сравнение с расчетами [12]. Состав

Таблица 4

Характеристики пористой смеси графита и меди

κ	x_a	m_a	x_{gr}	x_{Cu}
1,0	0	0	0,20	0,8
1,0	0	0	0,40	0,6
1,0	0	0	0,60	0,4
1,0	0	0	0,80	0,2
0,8	0,000 079	0,121	0,40	0,6
0,8	0,000 058	0,092	0,20	0,8
0,8	0,000 045	0,073	0,08	0,92
0,7	0,000 099	0,147	0,20	0,8
0,7	0,000 077	0,118	0,08	0,92

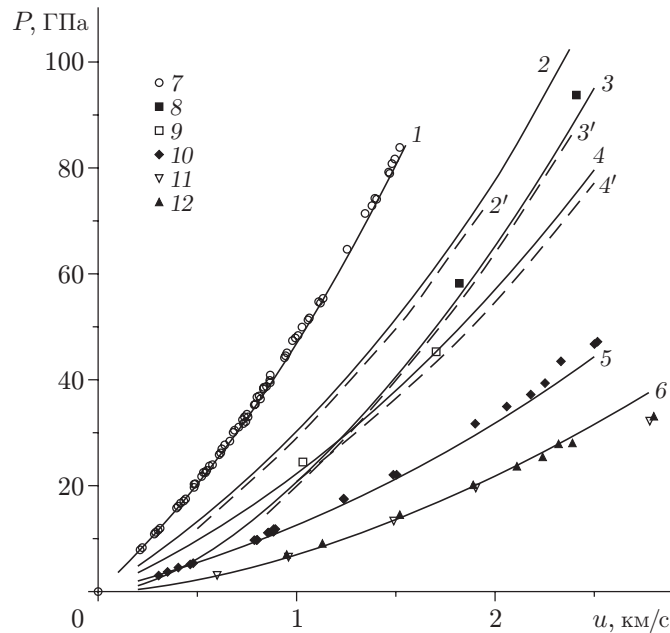


Рис. 4. Ударные адиабаты смеси:

1, 7 — сплошная медь; 2, 2' — сплошная смесь графита (20 %) и меди; 3, 3', 8, 9 — пористая смесь графита (8 %) и меди ($\kappa = 0,8$); 4, 4' — сплошная смесь графита (40 %) и меди; 5, 10 — сплошной графит; 6, 11, 12 — пористый графит ($\kappa = 0,8$); 1-6 — расчетные данные настоящей работы; 2'-4' — расчетные данные [12]; 7 — данные [8]; 8, 9 — экспериментальные данные [12] (8 — в опытах алмаз не обнаружен; 9 — в опытах обнаружен алмаз); 10 — данные [9]; 11 — данные [10]; 12 — данные [11]

исследованных смесей приведен в табл. 4 (m_a — объемная концентрация воздуха; x_{gr} , x_{Cu} — массовые концентрации графита и меди соответственно).

Сравнение всех рассчитанных ударных адиабат с данными работ [8-12] (на рис. 4 приведены лишь некоторые результаты расчетов) позволяет сделать вывод о применимости предлагаемого уравнения состояния в виде (4), (5') для описания пористых смесей.

Итак, на примере равновесной трехкомпонентной смеси показано, что ее движение можно описать системой уравнений однофазной сплошной среды с некоторым сложным уравнением состояния, определяемым свойствами компонентов и их концентрациями.

Выводы. Проведенное исследование позволяет сделать следующие выводы.

В случае сильных ударных волн для воздуха можно использовать уравнение состояния в форме Ми — Грюнайзена.

В случае, когда движение компонентов относительно друг друга не учитывается, пористую смесь нескольких конденсированных веществ, находящуюся в термодинамическом равновесии, можно описать как однофазную сплошную среду с уравнением состояния в форме Ми — Грюнайзена, параметры которого выражаются через соответствующие параметры составляющих.

ЛИТЕРАТУРА

1. **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. В. М. Фомина. Новосибирск: Ин-т теорет. и прикл. механики, 1985. С. 231–235.
2. **Ляхов Г. М.** Основы динамики взрывных волн в грунтах и горных породах. М.: Недра, 1974. С. 100–110.
3. **Дунин С. З., Сурков В. В.** Структура фронта ударной волны в твердой пористой среде // ПМТФ. 1979. № 5. С. 106–114.
4. **Нигматулин Р. И.** Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. С. 48–51.
5. **Бельхеева Р. К.** Математическое моделирование поведения многокомпонентных смесей с помощью составного уравнения состояния // Краевые задачи и математическое моделирование / Под ред. В. О. Каледина. Новокузнецк: Новокузнецк. филиал-ин-т Кемер. гос. ун-та, 2004. С. 45–47.
6. **Физика** взрыва / Под ред. К. П. Станюковича. М.: Наука, 1975.
7. **Таблицы** термодинамических функций воздуха / Под ред. А. С. Предводителя. М.: Изд-во АН СССР, 1959. Т. 1–3.
8. **LASL Shock Hugoniot Data** / Ed. by S. P. Marsh. Berkeley: Univ. of California Press, 1980.
9. **Coleburn N. L.** The compressibility of pirolytic graphyte // J. Chem. Phys. 1964. V. 40, N 1. P. 71–77.
10. **Павловский М. Н., Дракин В. П.** К вопросу о металлической фазе углерода // Письма в ЖЭТФ. 1966. Т. 4, № 5. С. 169–172.
11. **McQueen R. G., Marsh S. P.** Hugoniot of graphytes of various initial densities and equation of state of carbon // Symp. on the high dynamic pressure. N. Y.: IUTAM, 1968. P. 207–216.
12. **Ставер А. М.** Исследование термодинамики фазового перехода графита в алмаз при ударном нагружении смесей углерод + металл // Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах. Черноголовка: Б. и., 1978. С. 131–136.

*Поступила в редакцию 29/XII 2005 г.,
в окончательном варианте — 8/XI 2006 г.*