

СТРОЕНИЕ ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ОДНОМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ

А. С. Буркацкий, Ю. Б. Кудасов, Д. А. Маслов, О. М. Сурдин

СарФТИ НИЯУ МИФИ, г. Саров Нижегородской обл.

Введение

Изучение структуры фронта ударной волны (ФУВ) в различных средах ведётся не один десяток лет. Наиболее изучен вопрос о строении фронта ударной волны в газообразной среде [1], выявлено существование скачка уплотнения и релаксационного слоя. При распространении ударной волны в плазме установлено возникновение на фронте двойного электрического слоя.

Изучение строения ФУВ в конденсированной среде осложняется большим количеством взаимодействий и необходимостью учёта нелинейности взаимодействия между частицами. В целях упрощения часто рассматривают модель одномерного кристалла. Одной из хорошо аналитически разработанных моделей твёрдого тела является модель цепочки частиц с нелинейным экспоненциальным взаимодействием [2]. В частности, для подобной цепочки найдено аналитическое решение для уединённой волны (солитона).

В работе предлагается новая итерационная методика расчёта распределения частиц на фронте ударной волны, основанная на законах сохранения массы, импульса и энергии вещества, пересекающего ФУВ.

Одномерный кристалл и ударная адиабата

Рассмотрим одномерный кристалл как цепочку одинаковых частиц, расположенных равноудаленно друг от друга вдоль прямой. Ограничимся только продольными перемещениями частиц. Вначале предположим, что взаимодействие имеет место только между ближайшими соседями. Потенциал взаимодействия между частицами выберем в форме Леннарда – Джонса (рис. 1)

$$U = \frac{U_0}{n-m} \cdot \left(\frac{n \cdot a^m}{r^m} - \frac{m \cdot a^n}{r^n} \right), \quad (1)$$

где U_0 – потенциал взаимодействия в равновесном положении (глубина потенциальной ямы, взятая со знаком минус), m, n – параметры потенциала, характеризующие силы притяжения и отталкивания между двумя соседними частицами, r – расстояние между частицами, a – равновесное расстояние между частицами.

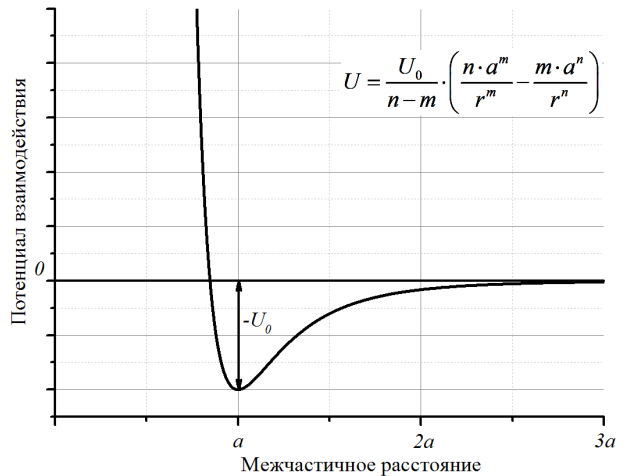


Рис. 1. Характерный вид потенциала Леннарда – Джонса

Сила взаимодействия двух соседних частиц определяется через производную потенциала и всегда ориентирована так, чтобы установить равновесное расстояние между частицами

$$F(r) = -\frac{dU}{dr} = \frac{m \cdot n \cdot U_0}{n-m} \cdot \left(\frac{a^m}{r^{m+1}} - \frac{a^n}{r^{n+1}} \right). \quad (2)$$

Скорость звука в кристалле в невозмущенном состоянии равна

$$c = \sqrt{\left. \frac{dF(\tau)}{d\tau} \right|_{\tau=\tau_0=M \cdot a^{-1}}} = \sqrt{\frac{m \cdot n \cdot U_0}{M}}, \quad (3)$$

где $\tau = M/r$ и $\tau_0 = M/a$ – массовые линейные плотности кристалла в произвольном и равновесном состоянии соответственно, M – масса частицы.

Для получения формулы ударной адиабаты в одномерном кристалле выпишем законы сохранения массы и импульса при прохождении вещества через ФУВ

$$\tau_0 \cdot D = \tau \cdot (D - u), \quad (4)$$

$$\tau_0 \cdot D \cdot u = F - F_0, \quad (5)$$

где D – скорость ФУВ, u – скорость вещества за поверхностью разрыва, F и $F_0 = 0$ – силы парного взаимодействия за и перед поверхностью разрыва. При рассмотрении распространения ударной волны по ненапряжённому кристаллу $F_0 = 0$.

Нормируем плотность вещества за ФУВ на плотность вещества до поверхности разрыва, скорости – на скорость звука в кристалле в невозмущенном состоянии, а силы – на $\tau_0 \cdot c^2$.

$$d = t \cdot (d - v), \quad (6)$$

$$d \cdot v = f, \quad (7)$$

где $t = \tau/\tau_0$ – безразмерная массовая линейная плотность кристалла, $d = D/c$ – безразмерная скорость ФУВ, $v = u/c$ – безразмерная скорость вещества за ФУВ, $f = F/\tau_0 c^2$ – безразмерная сила парного взаимодействия, действующая между частицами за ФУВ.

С учётом выражений

$$F(\tau) = F(r)|_{r=M/\tau} = \frac{m \cdot n \cdot U_0}{n - m} \cdot \left(\frac{a^m \cdot \tau^{m+1}}{M^{m+1}} - \frac{a^n \cdot \tau^{n+1}}{M^{n+1}} \right), \quad (8)$$

$$F(t) = F(\tau)|_{\tau=\tau_0 \cdot t=(M/a) \cdot t} = \frac{m \cdot n \cdot U_0}{a \cdot (n - m)} \cdot (t^{m+1} - t^{n+1}), \quad (9)$$

$$f(t) = \frac{F(t)}{\tau_0 \cdot c^2} = (t^{m+1} - t^{n+1}) / (m - n) \quad (10)$$

получаем систему трёх уравнений для нахождения параметров вещества за ФУВ в зависимости от безразмерной скорости ударной волны.

$$\begin{cases} d = t \cdot (d - v), \\ d \cdot v = f(t), \\ f(t) = (t^{m+1} - t^{n+1}) / (m - n). \end{cases} \quad (11)$$

Численное решение системы (11) позволяет построить графики зависимостей $t(d)$, $l(d)$, $v(d)$, $f(d)$ – рис. 2–3. Отметим отдельно, что система имеет математическое решение в области $d < 1$, которое, однако, не имеет физического смысла, т. к. скорость ФУВ здесь меньше скорости звука. Поэто-

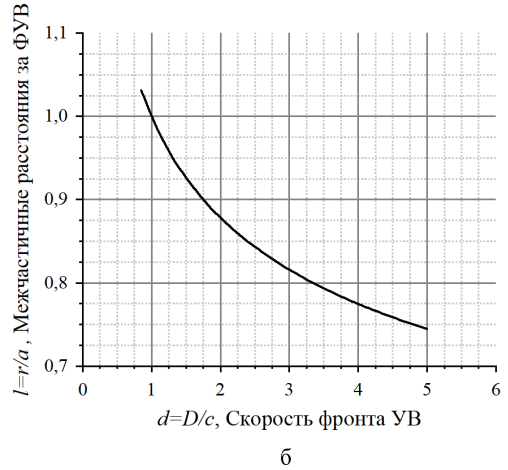
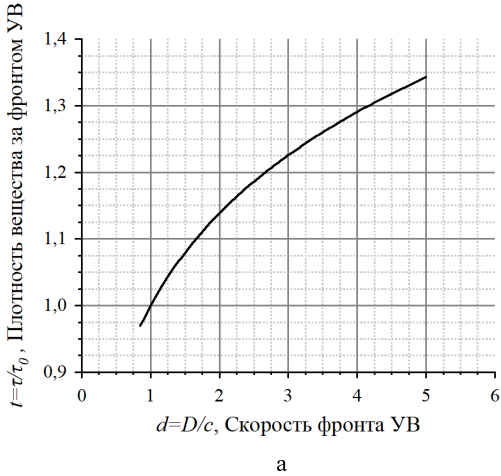


Рис. 2. Графики: а – зависимость плотности за ФУВ от скорости ФУВ, б – зависимость межчастичных расстояний за ФУВ от скорости ФУВ.

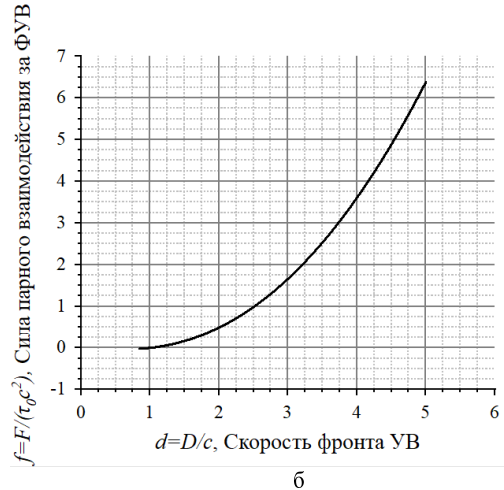
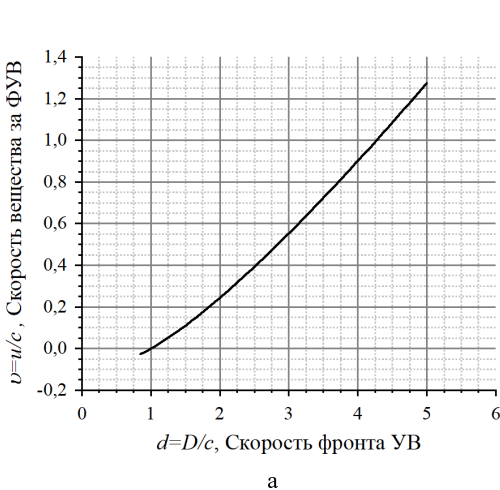


Рис. 1. Графики: а – зависимость скорости вещества за ФУВ от скорости ФУВ, б – зависимость силы парного взаимодействия за ФУВ от скорости ФУВ

му для этой области получены отрицательная скорость вещества и растяжение кристалла за ФУВ.

Теория расчёта распределения частиц во фронте ударной волны

Стационарность ударной волны обуславливает особое ограничение: при прохождении ФУВ через частицы вещества, каждая частица проходит через один и тот же набор состояний. Под состоянием в этом случае подразумевается скорость частицы и равнодействующая сила.

Расчет распределения будем вести итерационным методом. Воспользуемся законом сохранения масс (6) и определением скорости для отдельных частиц

$$d = t_i \cdot (d - v_i), \quad (12)$$

$$v_i = v_{i-1} + \Delta v_i, \quad (13)$$

где v_i – безразмерная скорость i -ой частицы, Δv_i – разница безразмерных скоростей i -ой и $(i-1)$ -ой частиц, t_i – безразмерная массовая линейная плотность в окрестностях i -ой частицы.

С учетом преобразований получим выражения удобные для расчета

$$l_i = (d - v_i)/d, \quad (14)$$

$$v_i = v_{i-1} + \frac{f_i}{d}, \quad (15)$$

где $l_i = 1/t_i$ – межчастичное расстояние между i -ой и $(i-1)$ -ой частиц, f_i – равнодействующая сила, действующая на i -ую частицу.

Вычисление равнодействующей силы f_i будем вести согласно формуле (16), выведенной из формулы (10) для всех частиц, а для последней частицы f_{count} , так как нет одного из соседей, нужно вводить дополнительную силу «поршня» F_{end} , которая бы действовала на частицу со стороны отсутствующего соседа (17). По сути, сила является силой парного взаимодействия с соседней частицей. Эта сила «поршня» является решением системы (11).

$$f(l_i) = (l_i^{-m-1} - l_i^{-n-1}) / (m - n), \quad (16)$$

$$f_N = F_{end} - (l_N^{-m-1} - l_N^{-n-1}) / (m - n). \quad (17)$$

Тогда получим систему уравнений (18)

$$\begin{cases} f_i = \left((l_{i+1}^{-m-1} - l_{i+1}^{-n-1}) - (l_i^{-m-1} - l_i^{-n-1}) \right) / (m - n), \\ f_N = F_{end} - \frac{l_N^{-m-1} - l_N^{-n-1}}{m - n}, \\ v_i = v_{i-1} + \frac{f_i}{d}, \\ l_i = (d - v_i)/d. \end{cases} \quad (18)$$

Эта система должна решаться в итерационном цикле программы. Блок-схема программы представлена на рис. 4.

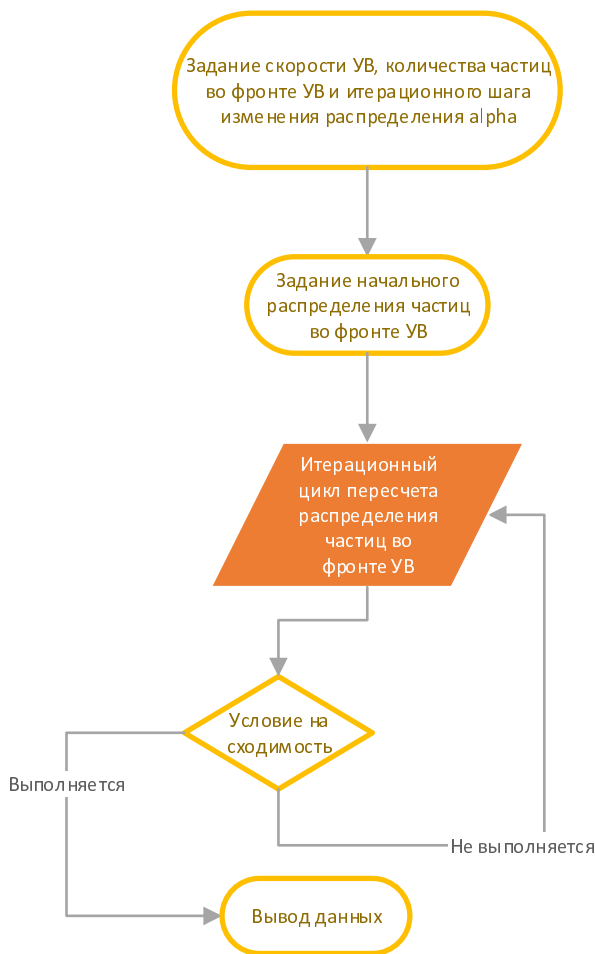
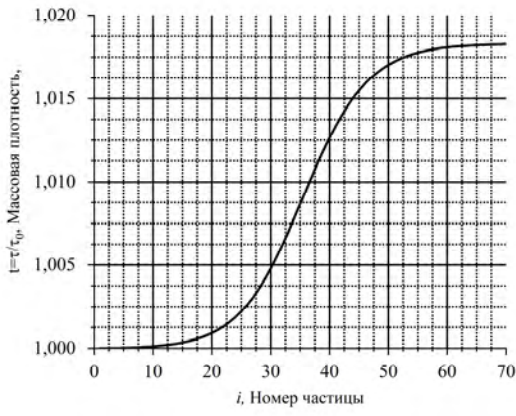


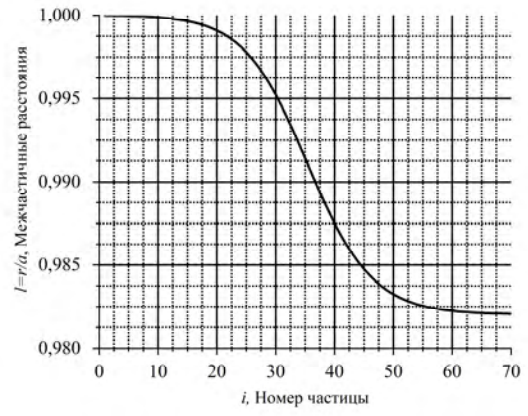
Рис. 4. Блок-схема программы по расчету распределения частиц во фронте ударной волны

Начальное распределение межчастичных состояний, может быть выбрано произвольно, так как итерационный метод предполагает нахождение по приближенному распределению некоторой величины следующего приближения, являющегося более точным. Метод позволяет получить распределение с заданной точностью, ограниченной вычислительными мощностями компьютера. Чтобы распределение было получено с заданной точностью за меньшее количество итераций, начальное распределение следует выбрать как можно ближе к целевому. Начальное распределение подается в итерационный цикл, где происходит расчет равнодействующих сил, действующих на частицы, массовой местной плотности, скорости вещества и пересчет межчастичных состояний в ФУВ (18). Входными данными для итерации $k+1$ будет являться изменённое распределение частиц в итерации k (19).

$$\overline{l_{in}^{k+1}} = \overline{l_{in}^k} + \alpha \cdot (\overline{l_{out}^k} - \overline{l_{in}^k}), \quad (19)$$

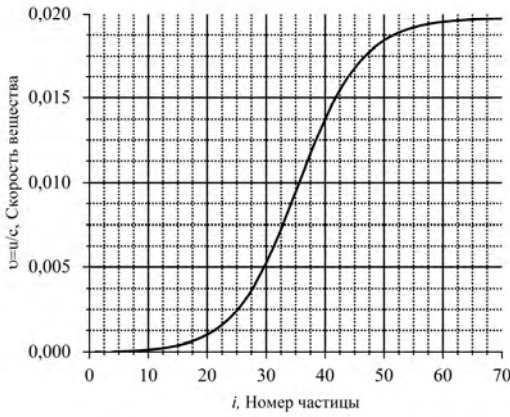


а

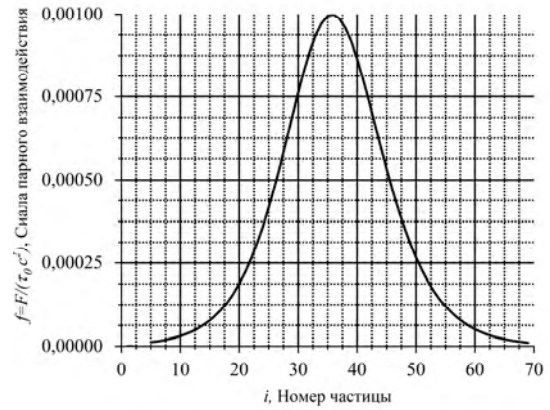


б

Рис. 5. Графики: а – распределения плотности по частицам, б – распределения межчастичных расстояний по частицам



а



б

Рис. 6. Графики: а – распределения скорости вещества по частиц, б – распределения силы парного взаимодействия по частицам

где вектор $\vec{l} = \{l_1, l_2, l_3, \dots, l_{N-1}, l_N\}$ определяет набор межчастичных расстояний, \vec{l}_{out}^k – набор, полученный в итерации k в результате подстановки набора \vec{l}_{in}^k на вход системы (18), где α – подстроечный параметр, варьируемый в пределах $0 \dots 1$. При значении параметра $\alpha = 1$ на вход в итерацию $k+1$ будет подан набор \vec{l}_{out}^k . Однако, подобный подход часто не позволяет достигнуть сходимости. Поэтому в работе используется постепенный переход к новому состоянию за счёт выбора дробного значения для параметра α .

Цикл будет выполняться до тех пор, пока не будет выполняться условие

$$\Delta < \varepsilon, \quad (20)$$

где Δ есть наибольший по модулю элемент вектора $\vec{l}^k - \vec{l}^{k-1}$, ε – заданная точность.

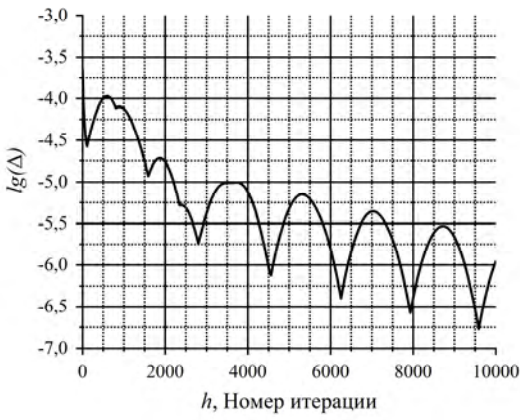
Когда условие (20) будет выполнено, итерационный цикл завершится. Полученные в результате расчёта распределения межчастичных расстояний, равнодействующих сил, плотности и скоростей частиц в ФУВ показаны на рис. 5–6.

Способ (19) эволюции системы может быть улучшен с целью уменьшения числа итераций. При достижении специального критерия самосогласования, например,

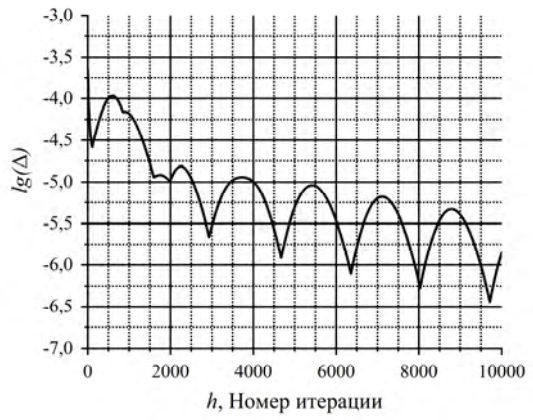
$$|l_{out(i)}^k - l_{in(i)}^k| < \delta, \quad (21)$$

где $l_{out(i)}^k$ – межчастичное расстояние между i -ой и $(i-1)$ -ой частиц на выходе из итерации k , $l_{in(i)}^k$

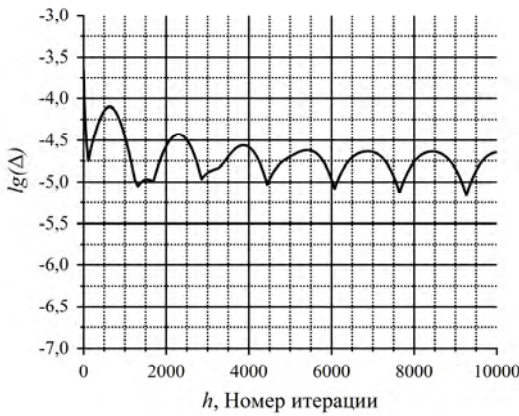
$l_{out(i)}^k$ – межчастичное расстояние между i -ой и $(i-1)$ -ой частиц на входе в итерацию k , δ – пороговое число для специального критерия самосогласования, может быть уменьшен характерный шаг перехода от «старого» состояния к «новому»



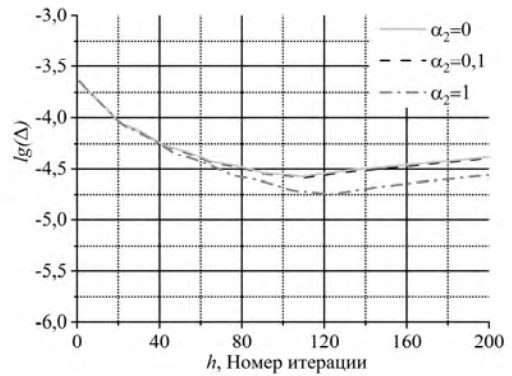
а



б



в



г

Рис. 7. Графики зависимости Δ от номера итерации: а – $\alpha_2 = 0$, б – $\alpha_2 = 0,1$, в – $\alpha_2 = 1$, г – сравнение зависимостей в начале цикла самосогласования

$$l_{in}^{k+1}(i) = \begin{cases} l_{in}^k(i) + \alpha_1 \cdot (l_{out}^k(i) - l_{in}^k(i)), & |l_{out}^k(i) - l_{in}^k(i)| \geq \delta \\ l_{in}^k(i) + \alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot (l_{out}^k(i) - \overline{l_{in}^k}), & |l_{out}^k(i) - l_{in}^k(i)| < \delta \end{cases}, (22)$$

где α_1 – подстроечный параметр, варьируемый в пределах $0 \dots 1$, α_2 – дополнительный подстроечный параметр, варьируемый в пределах $0 \dots 1$.

Таким образом, эффективный подстроечный параметр $\alpha_1 \alpha_2$ будет разным для разных $l_{in}^{k+1}(i)$, в зависимости от того, выполняется ли специальный критерий самосогласования (21) или нет.

Для достижения неограниченной точности расчёта предлагается постепенное уменьшение порога $\delta_{New} = 0,8 \cdot \delta_{Old}$, например, при достижении условия (21) для заданного количества частиц M .

$$If \infty [m \leq M, \delta_{New} = 0,8 \cdot \delta_{Old}], \quad (23)$$

где m – число частиц, для которых не выполняется условие (22).

Характерные графики сходимости вектора \vec{l} представлены на рис. 7.

В зависимости от скорости ФУВ была посчитана его ширина. Ширина ФУВ считается, как сумма межчастичных расстояний частиц, которые находятся в ФУВ. Частица находится в ФУВ, если она удовлетворяет условию (25). График зависимости ширины ФУВ от скорости ФУВ представлен на рис. 8.

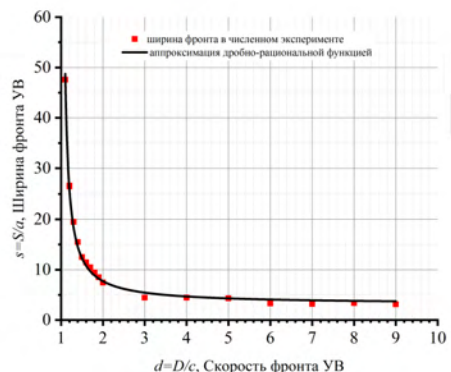


Рис. 8. График зависимости ширины ФУВ от скорости ФУВ

$$l_1 - 0,99 \cdot (l_1 - l_N) \leq l_i \leq l_1 - 0,01 \cdot (l_1 - l_N), \quad (25)$$

где l_i – межчастичное расстояние между i -ой и $(i-1)$ -ой частиц, N – количество частиц в расчете.

При устремлении скорости ФУВ к скорости звука в невозмущённом кристалле количество частиц в ФУВ увеличивается. При этом амплитуда ФУВ уменьшается. При нарастании скорости ФУВ его ширина быстро уменьшается до нескольких межчастичных расстояний и затем меняется слабо при дальнейшем увеличении скорости ФУВ.

Заключение

В работе предложена методика расчёта структуры ФУВ. Методика опробована на примере одно-

мерного кристалла, составленного из частиц, взаимодействующих между собой согласно потенциалу Леннард – Джонса. Показана возможность самосогласованного решения. Получены характеристики частиц в ФУВ. Исследовано поведение ширины ФУВ от её скорости. Предполагается дальнейшее развитие методики для исследования структуры ФУВ реальных кристаллов посредством выполнения квантово-механических расчётов.

Литература

1. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П., Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, М.: Наука, 1966.
2. Тода М., Теория нелинейных решёток, 1984.