

Shock Interaction with Suspension of Metallic Particles in Liquid

M.S. Egorova^{1,2}, S.A. Mursov^{1,2,3}, V.V. Zhakhovsky^{1,2}, A.N. Parshikov^{1,4}

¹*Dukhov Research Institute of Automatics (VNIIA),
Moscow, 127055, Russian Federation*

²*Landau Institute for Theoretical Physics RAS,
Moscow Region, Chernogolovka, 142432, Russian Federation*

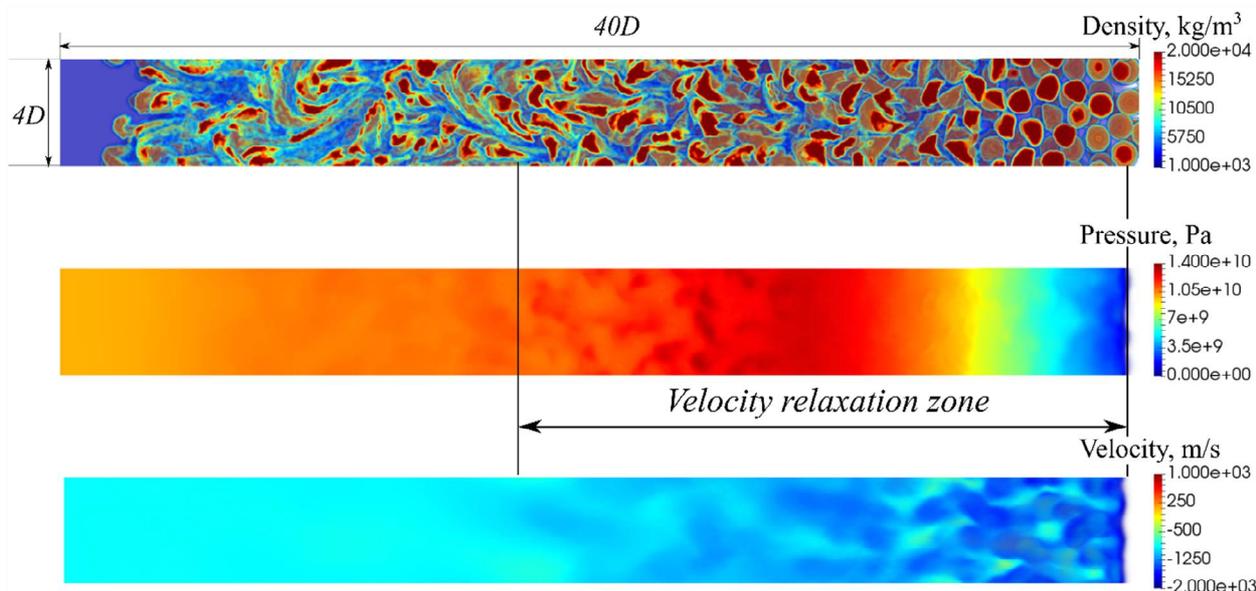
³*Moscow Institute of Physics and Technology (State University),
Moscow Region, Dolgoprudny, 141701, Russian Federation*

⁴*Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, 125412, Russian Federation*
egorova.maria.serg@gmail.com

Abstract

The research of shock wave interaction with a heterogeneous medium is conducted. The medium is the fluid with suspended liquid metallic particles of 1 μm diameter without regard for strength in it. Surface tension, physical viscosity and heat conduction are not taken into account. The mesoscopic smoothed particles hydrodynamics modeling demonstrates strong deformation of the metallic particles.

Keywords: shock wave interaction, suspended liquid particles, suspended matter, velocity nonequilibrium



Small voxel rendered part of the computational domain of size $40D \times 4D \times 4D$ ($D = 1 \mu\text{m}$ is the diameter of a metallic particle) shown at the time moment when shock wave has passed through the first several dozens micrometers of the suspension length. The modeling was conducted with 24.3 million SPH-particles using our VD^3 algorithm of parallelization

УДК 532.59

Прохождение ударной волны через взвесь металлических частиц в жидкости

М.С. Егорова^{1,2}, С.А. Мурзов^{1,2,3}, В.В. Жаховский¹, А.Н. Паршиков^{1,4}

¹ФГУП ВНИИА им. Н.Л. Духова,

Российская Федерация, Москва, 127055, Сущевская ул., д. 22

²ИТФ им. Ландау РАН, Российская Федерация,

Московская область, г. Черноголовка, 142432, просп. Академика Семенова, д. 1-а

³МФТИ (ГУ), Российская Федерация,

Московская область, г. Долгопрудный, 141701, пер. Институтский, д. 9

⁴ОИВТ РАН, Российская Федерация, Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2

egorova.maria.serg@gmail.com

Аннотация

В данной работе исследован процесс прохождения ударной волны через гетерогенную среду, представляющую собой смесь из жидкости и металлических сферических частиц диаметром 1 мкм без учета их прочности. Поверхностное натяжение, физическая вязкость и теплопроводность не учитывались. Мезоскопическое моделирование методом сглаженных частиц показало значительные деформации металлических частиц.

Ключевые слова: ударные волны, жидкие металлические частицы, взвесь, скоростная неравновесность

1. Введение

Движение ударной волны (УВ) по взвеси, состоящей из жидких металлических частиц и менее плотной несущей фазы, характеризуется отсутствием скоростного равновесия за фронтом ударной волны между перечисленными компонентами. Установление скоростного равновесия между металлическими частицами и несущей фазой (жидкостью) происходит в зоне релаксации скорости и достигается вследствие обмена импульсом между компонентами. В работе считается, что этот обмен происходит вследствие многократных отражений УВ от металлических частиц, то есть при действии локальных волн давления со стороны несущей фазы на металлические включения.

В зоне релаксации скорости происходит фильтрация несущей фазы между частицами металлических включений, поэтому зону релаксации скорости можно назвать «зоной перемешивания». Явления такого рода наблюдаются, например, при действии лазерного импульса большой интенсивности на поверхность металла, покрытого слоем воды [1]. Расплавленная часть скин-слоя выбрасывается в виде облака жидких частиц навстречу потоку лазерного излучения. Процесс может сопровождаться эффектами кавитации и носит весьма сложный характер.

При давлении за фронтом ударной волны порядка нескольких гигапаскалей протяжённость зоны перемешивания не может быть измерена экспериментально. В литературе отсутствуют данные о численном моделировании подобных задач в мезоскопическом приближении. Моделирование гетерогенных сред в мезоскопическом приближении предполагает рассматривать реальную структуру среды жидкость/частицы, задавая каждую частицу включения как отдельную расчётную подобласть. Обычно для расчетов сред с включениями используются гомогенизированные модели или модели осредненной смеси [2–4], кото-

рые рассматривают жидкость и включения как взаимопроникающие континуумы, без явного выделения в пространстве границ между жидкостью и включениями. Взаимодействие между такими взаимопроникающими континуумами при воздействии на среду учитывается с помощью искусственно сконструированных обменных членов в правых частях уравнений сохранения, записанных отдельно для каждого континуума, а построение этих обменных членов составляет суть вышеупомянутых моделей. Тем не менее, встречаются валидированные экспериментальными данными [5, 6] расчеты прохождения УВ через завесу частиц [7–10], где каждая частица представляет собой отдельную расчетную подобласть с явным выделением границы раздела между материалом частицы и материалом окружающей ее среды, но такие расчеты проводились при давлениях намного меньших, чем предполагается в данной работе. Таким образом, в работах [7–10] не учитывается деформация частиц включений. Тем не менее, в этих работах показано, что прохождение УВ через завесу конечной длины плотных частиц в конечном счете приводит к расширению зоны завесы с образованием искажений фронта волны из-за переотражения волны от включений. Случай воздействия более интенсивной ударной волны изучен для одной частицы в работах [11, 12]. Показано, что частица существенно деформируется в ходе процесса.

Настоящая работа является развитием более простой в мезоскопической постановке задачи работы [13], где рассматриваются релаксационные эффекты при ударно-волновом воздействии на гетерогенную среду регулярной структуры. Предлагаемая работа учитывает произвольную структуру включений, коллективные эффекты во взвеси и показывает структуру зоны перемешивания за фронтом ударной волны, проходящей через взвесь жидких плотных частиц в менее плотной жидкости. Моделируемое явление и получаемые результаты имеют важное значение в перспективных нанотехнологиях.

2. Моделирование зоны релаксации при воздействии УВ на взвесь

2.1. Расчетная область. Постановка задачи

Для исследования динамики зоны перемешивания была принята схема расчетной области, показанная на рис. 1. Расчетная область представляла собой параллелепипед протяженностью $-L_f < x < L_{fM}$, ограниченный слева и справа жесткими стенками, причём правая стенка подвижна. Вся область заполнена водой с плотностью ρ_f и с давлением P , в $x = 0$ область разделена контрольной поверхностью. Слева от контрольной поверхности в подобласти $-L_f < x \leq 0$ находится вода без включений, справа от контрольной поверхности в подобласти $0 < x < L_{fM}$ размещены частицы включений из металла плотностью ρ_M и давлением P . Объемная доля включений в правой подобласти равна φ . Таким образом, правая подобласть представляет собой взвесь жидких металлических частиц в жидкой несущей фазе с равновесием по давлению, а контрольная поверхность является контактной поверхностью между водой и взвесью вода/металл. Размер сферических металлических частиц взвеси для всех вариантов расчета составлял $D = 1$ мкм. Размер расчетной области по осям y, z равен $L_y = L_z = 4D = 4$ мкм, по этим осям установлены периодические граничные условия.

Расчетная область полностью заполнена SPH-частицами, содержащими жидкость или металл, в зависимости от принадлежности SPH-частицы той или иной точке пространства. Все SPH-частицы расположены в узлах регулярной декартовой сетки. В момент времени $t = 0$ все SPH-частицы и правая стенка приобретают скорость v_0 , что приводит к удару жидкости о левую стенку и распространению вправо ударной волны. Эта ударная волна достигает контактного разрыва, порождая отраженный от металлических частиц ударный импульс (он распространяется обратно к неподвижной левой стенке). Первичная УВ продолжает двигаться по взвеси к правой стенке, перемещение которой с предписанной скоростью $v_0 = \text{const}$ препятствует возникновению волны разрежения у правой границы области.

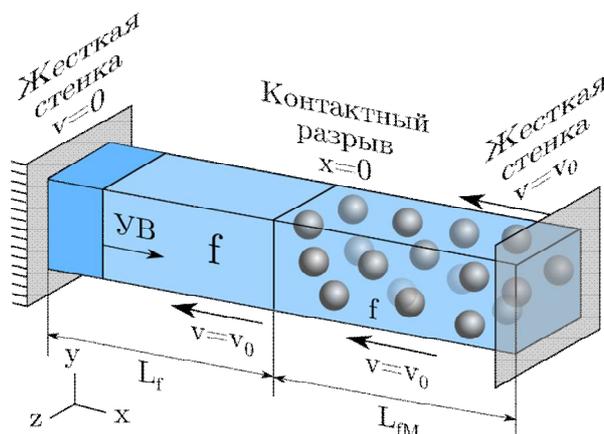


Рис. 1. Схема расчетной области

Расчёт проводится до момента, пока отражённые от жестких стенок ударные волны не вернуться в зону перемешивания.

2.2. Особенности используемого в моделировании метода сглаженных частиц SPH

Система законов сохранения в идеальной среде в материальных производных может быть записана следующим образом:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla P \quad (2)$$

$$\frac{d\left[e + \left(v^2/2\right)\right]}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (P \mathbf{v}) \quad (3)$$

Здесь ρ — плотность среды; \mathbf{v} — скорость; P — давление; e — удельная внутренняя энергия на единицу массы.

Метод сглаженных частиц (Smoothed particle hydrodynamics, SPH) — это метод Лагранжа с пространственной аппроксимацией законов сохранения до системы обыкновенных дифференциальных уравнений [14]. Сплошная среда в нем представляется в виде набора лагранжевых частиц фиксированной массы m (SPH-частицы), центрам которых \mathbf{v} приписываются физические величины среды. Система частиц используется для аппроксимации пространственных производных в уравнениях (1)–(3). Форма частиц считается неопределенной, тем не менее, каждой частице i приписывается характерный размер, обычно называемый диаметром, $d_i = \sqrt[3]{m_i/\rho_i}$. SPH-частицы меняют своё положение в соответствии с полученными значениями скорости на каждом шаге вычислений

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

Модификация метода с использованием решения задачи Римана на границе между SPH-частицами [15] дает пространственную аппроксимацию законов сохранения для частицы i в следующем виде:

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -2\rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left(v_i^R - v_{ij}^{*R} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}; \quad (4)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{2}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} P_{ij}^* \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \mathbf{e}^R; \quad (5)$$

$$\frac{d\left(e_i + \frac{v_i^2}{2}\right)}{dt} = \frac{2}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} P_{ij}^* v_{ij}^{*R} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \quad (6)$$

В системе (4)–(6) состояние v_{ij}^{*R} , P_{ij}^* — решение одномерной задачи Римана вдоль вектора $\mathbf{r}_{ji} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$, соединяющего центры пары частиц i и j , для скорости и давления соответственно, вектор направления $\mathbf{e}^R = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) / |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$, $v_i^R = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}^R$. Используется решение Дуковица [16].

Функция-ядро $W_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}|, h_{ij})$ принималась в форме полинома Вендланда [17]

$$W_{ij}(q, h_{ij}) = \frac{1}{15h_{ij}^3} \begin{cases} (1-q)^4(1+4q), & q = \alpha |\mathbf{r}_{ij}| / h_{ij} < 1, \\ 0, & q \geq 1 \end{cases}$$

Сглаживающая длина $h_{ij} = (d_i + d_j) / 2$, параметр $\alpha = 1.936$.

2.3. Уравнение состояния

Для замыкания системы (1)–(3) используется уравнение состояния Ми–Грюнайзена, связывающее давление P с плотностью ρ и внутренней энергией материала e

$$P = P_H + \gamma_G \rho (e - e_H),$$

где

$$P_H = \frac{\rho_0 c_a^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right)}{\left[1 - \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) s_a\right]^2}, \quad e_H = \frac{1}{2} P_H \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}\right)$$

Здесь γ_G есть коэффициент Грюнайзена; параметры с индексом « $(\cdot)_0$ » относятся к начальному состоянию вещества; величины c_a и s_a есть коэффициенты ударной адиабаты, связывающей скорость ударной волны U_s с массовой скоростью вещества U_p за её фронтом

$$U_s = c_a + s_a U_p$$

Параметры веществ, которые необходимы для расчета уравнения состояния, приведены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры уравнения состояния для жидкости f и металлической взвеси M

	ρ_0 , кг/м ³	c_a , м/с	s_a	γ_G
f	1000	2560	1.800	1.6
M	19320	1593	1.477	2.05

3. Результаты моделирования

При моделировании удара системы жидкость/частицы о стенку исходное фоновое давление принималось равным $P_0 = 0$ ГПа. Скорость всей системы в начальный момент времени задавалась величиной $v_0 = 2000$ м/с. Давление за фронтом ударной волны при этом составило 7.5 ГПа. Объемная доля включений металла M была равной $\varphi = 0.3$. Начальное состояние в системе было задано в соответствии с уравнением состояния при $P = P_0$. Геометрические параметры расчетной области: $L_f = 300$ мкм, $L_{fM} = 150$ мкм. В начальный момент времени SPH-частицы расставлены по узлам декартовой сетки, вдоль осей y , z приходилось по 60 частиц. Всего в расчете участвовало 24.3 млн частиц. Параллелизация расчета осуществлялась в соответствии с методом автобалансирующей декомпозиции по Вороному [18].

Анализ результатов моделирования показан с момента времени $t = 64.3$ нс, когда УВ, созданная ударом всей системы о жесткую стенку, входит в область, где находится взвесь жидких металлических частиц. С этого момента начинается образование зоны скоростной неравновесности (рис. 2). Одновременно с этим отраженная УВ движется влево от границы взвеси. Профиль проходящей УВ меняет форму, металлические частицы в зоне скоростной неравновесности деформируются.

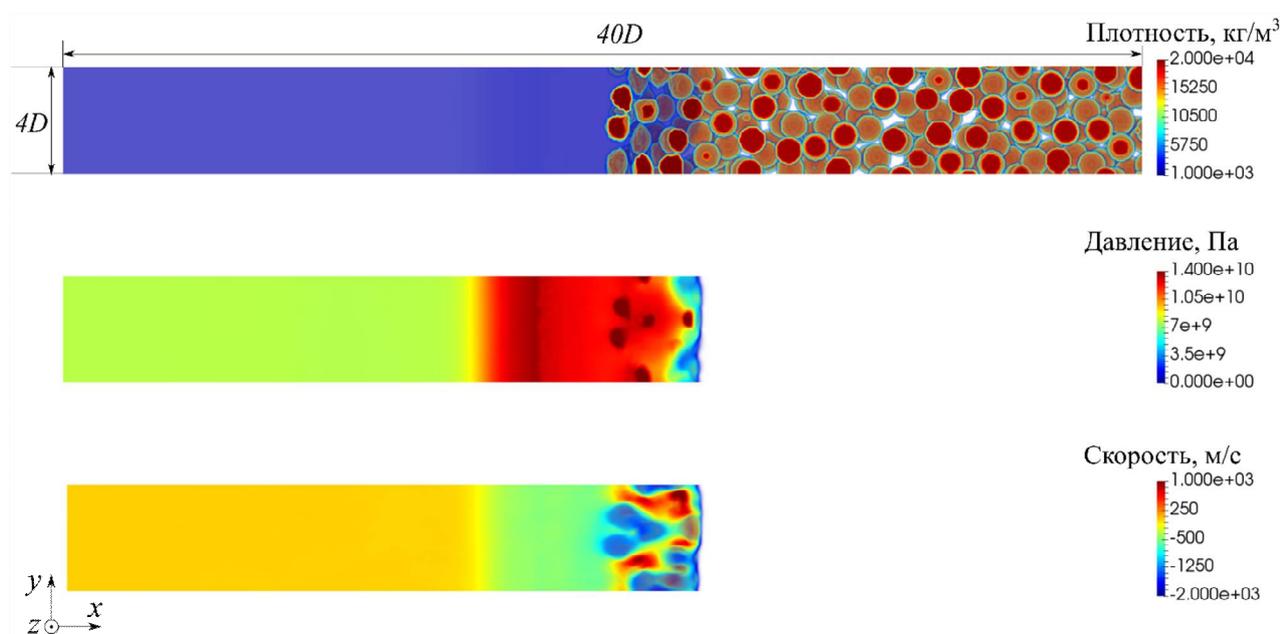


Рис. 2. Воксельное изображение участка расчетной области размером $40D \times 4D \times 4D$ в момент времени $t = 65.1$ нс. Прозрачность вокселя обратно пропорциональна значению переменной в объеме вокселя (синие тона прозрачны). Верхний рисунок показывает распределение плотности, средний рисунок – давления, нижний – распределение продольных (вдоль оси x) скоростей SPH-частиц

В зоне, где происходит фильтрация «чистой» жидкости во взвесь, начинает устанавливаться скоростное равновесие (рис. 3). К этому моменту жидкие частицы металла оказываются сильно деформированными. Возможно дать оценку пространственному масштабу, на котором устанавливается равновесие по скорости: длина участка релаксации составляет порядка 10 диаметров частиц при заданных в расчёте давлении и объемной доле частиц металла. Хорошо видно, что ни одна из фаз в зоне фильтрации не компактируется, то есть не возникает областей, сплошь заполненной одной компонентой. На рис. 4 показано дальнейшее развитие процесса скоростной релаксации. На данный момент времени возможно выделить зону установившегося течения (слева на рис. 4), где более не происходит перемеши-

вание компонентов взвеси. При этом зона релаксации по скорости смещается в сторону ударной волны.

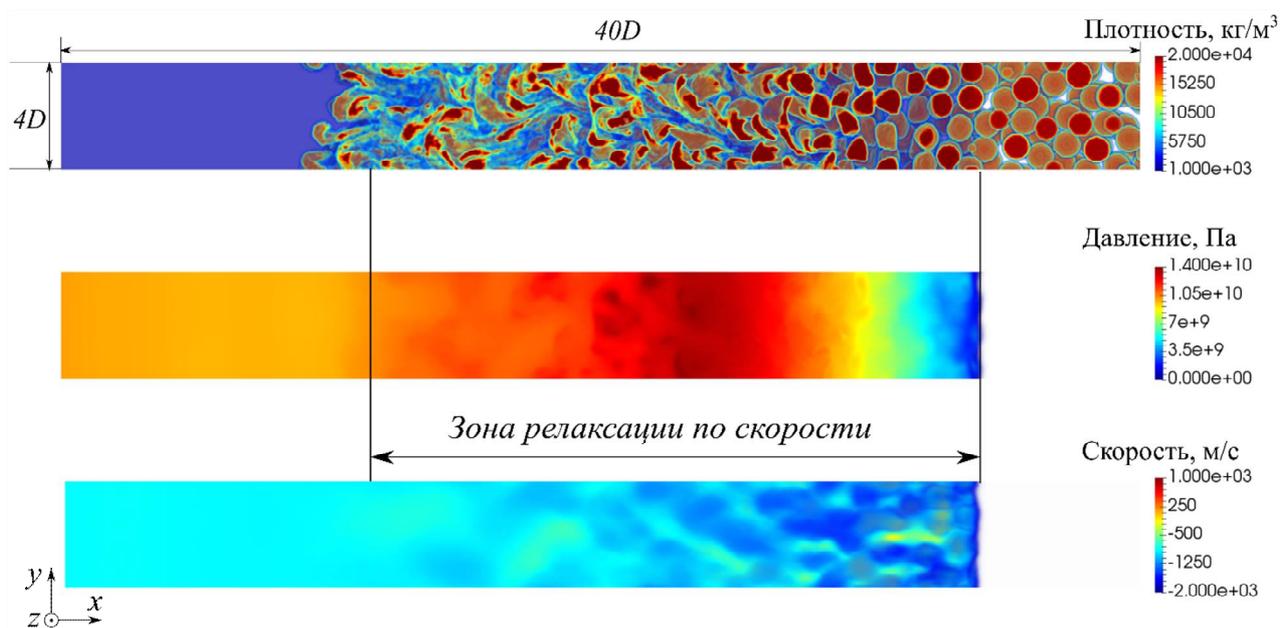


Рис. 3. Воксельное изображение участка расчетной области размером $40D \times 4D \times 4D$ в момент времени $t = 75.4$ нс. Верхний рисунок показывает распределение плотности, средний рисунок – давления, нижний – распределение продольных (вдоль оси x) скоростей SPH-частиц

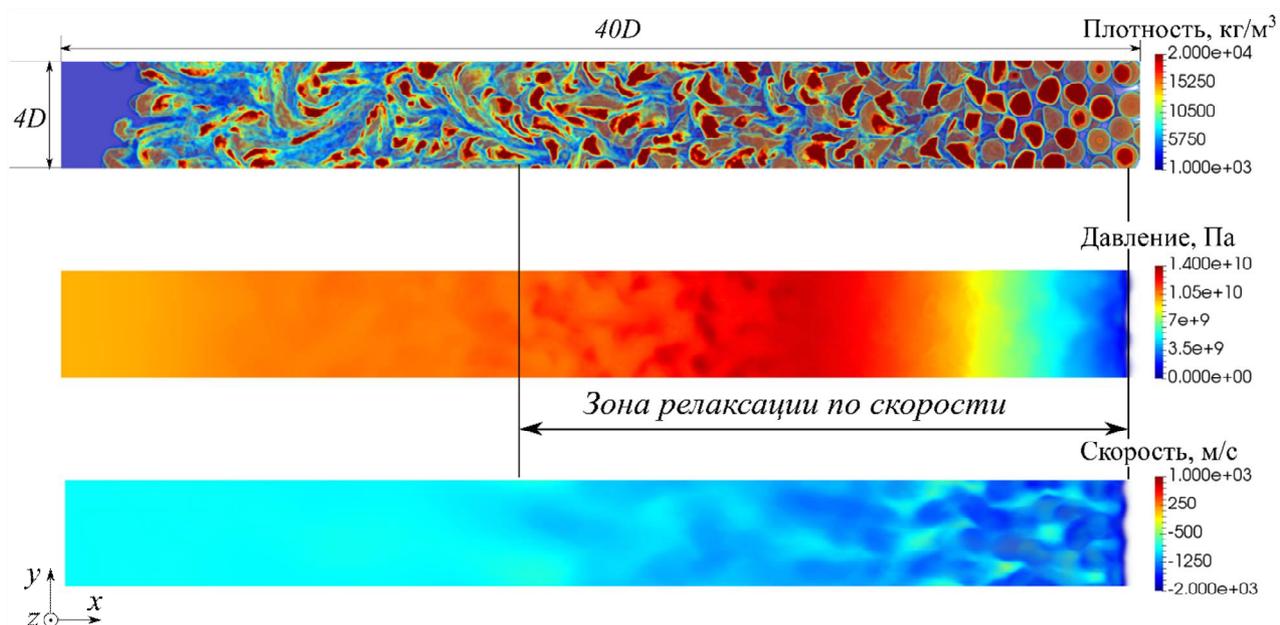


Рис. 4. Воксельное изображение участка расчетной области размером $40D \times 4D \times 4D$ в момент времени $t = 83.6$ нс. Верхний рисунок показывает распределение плотности, средний рисунок – давления, нижний – распределение продольных (вдоль оси x) скоростей SPH-частиц

Осредненные по осям y, z характеристики потока во всем участке расчетной области, описывающем взвесь, в более поздний момент времени $t = 112.3$ нс представлены на графике на рис. 5. График иллюстрирует отсутствие компактирования, о котором речь шла выше. Немонотонность на графике зависимости объемных долей металла и несущей фазы (жидко-

сти) по оси x обусловлена методом осреднения в условиях полностью случайного расположения в объеме расчетной области жидких металлических частиц. В каждом сечении, где проводилось осреднение, соотношение жидкость-металл было различным.

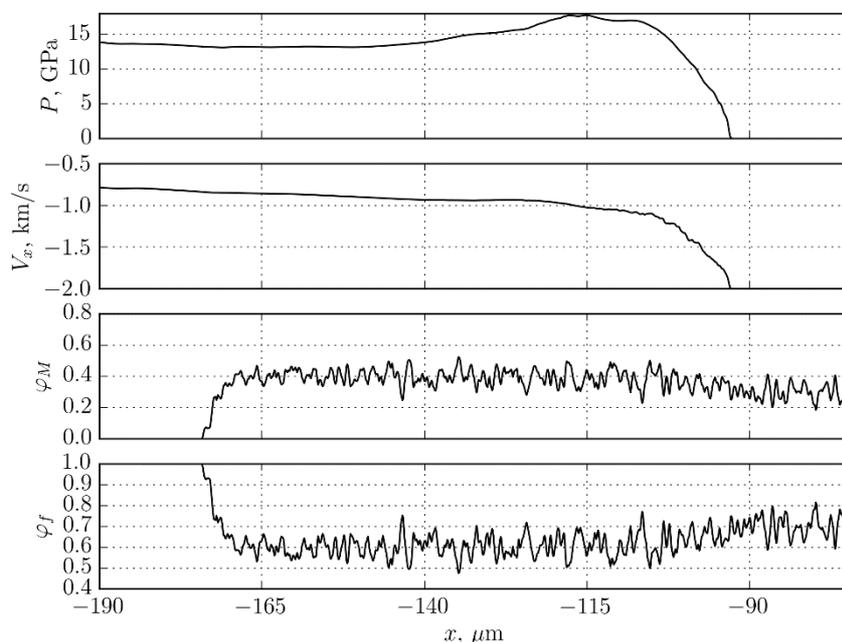


Рис. 5. Распределения средних по сечению Oyz давления, скорости по оси x , объемной доли вещества M (золота) и объемной доли вещества f (воды) в момент времени $t = 112.3$ нс

4. Заключение

Мезоскопическое моделирование явления прохождения ударной волны через взвесь жидких металлических частиц в воде показало, что скоростное равновесие между несущей жидкой фазой (вода) и жидкими металлическими включениями достигается на пространственном масштабе порядка 10 диаметров частиц при давлениях порядка гигапаскалей и объемной доле металлических частиц 0.3. Установлено также, что в рассматриваемых условиях эта зона релаксации, в которой происходит выравнивание скоростей фаз и потеря первоначальной формы металлических частиц, практически совпадает по протяженности с зоной ударного импульса. Объемные доли фаз в зоне релаксации изменяются незначительно, что позволяет сделать вывод об отсутствии в данном случае слипания частиц при ударном нагружении среды.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа была выполнена при поддержке гранта РФФ 14-19-01599.

Литература

1. External field-assisted laser ablation in liquid: An efficient strategy for nanocrystal synthesis and nanostructure assembly / J. Xiao, P. Liu, C.X. Wang, G.W. Yang. // Progress in Materials Science. 2017. Vol. 87. Pp. 140–220.
2. Нигматуллин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978. 336 с.
3. Ishii, M. Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow. Springer-Verlag New York, 2011. 518 p.
4. Drew D.A., Passman S.L. Theory of multicomponent fluids. Springer Science & Business Media, 2006. Vol. 135.

5. A multiphase shock tube for shock wave interactions with dense particle fields / Justin L. Wagner, Steven J. Beresh, Sean P. Kearney et al. // *Experiments in Fluids*. 2012. Jun. Vol. 52, no. 6. Pp. 1507–1517.
6. Dense particle cloud dispersion by a shock wave / Mark Kellenberger, Craig Johansen, Gaby Ciccarelli, Fann Zhang // *Shock waves*. 2013. Vol. 23, no. 5. Pp. 415–430.
7. Shock interaction with one-dimensional array of particles in air / P Sridharan, Thomas L Jackson, J Zhang, S Balachandar // *Journal of Applied Physics*. 2015. Vol. 117, no. 7. P. 075902.
8. Interaction of a planar shock wave with a dense particle curtain: Modeling and experiments / Y Ling, JL Wagner, SJ Beresh et al. // *Physics of Fluids*. 2012. Vol. 24, no. 11. P. 113301.
9. Unsteady effects in dense, high speed, particle laden flows / JD Regele, J Rabinovitch, T Colonius, G Blanquart // *International Journal of Multiphase Flow*. 2014. Vol. 61. Pp. 1–13.
10. Interaction of a shock wave with an array of particles and effect of particles on the shock wave weakening / PV Bulat, TE Ilyina, KN Volkov et al. // *Acta Astronautica*. 2017. Vol. 135. Pp.131–138.
11. Shock interaction with a deformable particle: Direct numerical simulation and point-particle modeling / Y Ling, A Haselbacher, S Balachandar et al. // *Journal of Applied Physics*. 2013. Vol. 113, no. 1. P. 013504.
12. Shock interaction with one-dimensional array of particles in air / P Sridharan, Thomas L Jackson, J Zhang, S Balachandar // *Journal of Applied Physics*. 2015. Vol. 117, no. 7. P. 075902.
13. Медин С.А., Паршиков А.Н. Численное моделирование структуры ударных волн в гетерогенных двухкомпонентных средах // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2008. Т. 7. <http://chemphys.edu.ru/issues/2008-7/articles/448/>
14. Gingold R.A., Monaghan J.J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 1977. V. 181, no. 3. Pp. 375–389.
15. Parshikov A.N., Medin S.A. Smoothed Particle Hydrodynamics Using Interparticle Contact Algorithms // *Journal of Computational Physics*. 2002. V. 180, no. 1. Pp. 358–382.
16. Dukowicz J.K. A general, non-iterative Riemann solver for Godunov's method // *Journal of Computational Physics*. 1985. Vol. 61, no. 1. Pp. 119–137.
17. Dehnen W., Aly H. Improving convergence in smoothed particle hydrodynamics simulations without pairing instability // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2012. V. 425, no. 2. Pp. 1068–1082.
18. Auto-balancing algorithm for parallel SPH simulation of materials in extremes / Dyachkov S.A., Egorova M.S., Mursov S.A., Parshikov A.N., Zhakhovsky V.V. // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2017. Vol. 38, no. 5. Pp. 893–897.

Статья поступила в редакцию 4 декабря 2017 г.