



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 538.9

С.И. Иголкин, А.И. Мелькер

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ГИДРОДИНАМИКА ПОДВОДНОГО ВЗРЫВА

В работе рассматривается молекулярно-динамический подход к изучению подводного взрыва. Была разработана компьютерная программа, которая позволяет производить моделирование подводного взрыва для жидкости Леннард-Джонса. Численное моделирование этого процесса с помощью указанного метода является естественной альтернативой эксперименту. Результаты расчета динамического процесса, который должен развиваться после подводного взрыва, показывают поразительное сходство с известной эволюцией системы, а именно: распространение фронта ударной волны, формирование кратера, распад ударной волны при достижении границ свободной поверхности с последующим подъемом слоя воды над областью взрыва.

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ, УДАРНАЯ ВОЛНА, ПОДВОДНОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ, ЖИДКОСТЬ ЛЕННАРД-ДЖОНСА, ГИДРОДИНАМИКА.

Введение

Современную науку сейчас уже сложно представить без компьютерного моделирования (эксперимента), которое используется наряду с традиционными экспериментальными и теоретическими исследованиями. С его помощью могут быть даны ответы на вопросы, которые относятся к процессам, развивающимся в условиях, где не представляется возможным провести реальный эксперимент. Именно при решении сложных задач главной является степень применимости того или иного численного метода, вычислительного алгоритма, т. е. насколько точно они описывают изучаемую систему с учетом аппроксимации исходных дифференциальных уравнений, неточностей задания начального состояния и ошибок округления. Практика показывает, что к разрешению сложных, нетривиальных задач проявляют интерес исследователи по всему миру, ставя перед собой цели по изучению самых разных проблем, применимости различных вычислительных методов и

подходов к решению таких систем.

К одному из таких сложных процессов относится подводный взрыв. Интерес к его исследованию изначально был вызван необходимостью решения широкого спектра технических задач, возникших в годы второй мировой войны. Внимание, уделяемое данной проблеме в тот период времени, привело к интенсивному развитию представлений о характере взрывных движений. Исследователями было отмечено, что работа над проблемой механики взрыва послужила толчком к значительному прогрессу в смежных разделах прикладной математики и механики сплошных сред [1].

Учеными проводились исследования подводного взрыва, взрыва в грунтах; изучалось поведение металлов под действием продуктов детонации взрывчатых веществ; эти продукты создают для среды экстремальные условия в виде гигантских давлений (в сотни кбар) и температур (достигают нескольких тысяч градусов). Установлено, что при таких условиях многие твердые сре-

ды «забывают» о своих прочностных свойствах, жесткой кристаллической структуре и ведут себя по законам гидродинамики. В работах по данной тематике рассматриваются теоретические и экспериментальные методы исследования подводного взрыва, при этом задачи о поведении различных сред при взрывном нагружении, в основном, описывают в рамках существующих математических постановок и моделей [2]. Как следует из монографии В.К. Кедринского [3], в исследованиях подводного взрыва условно выделяют три основных блока проблем:

ударные волны, уравнения состояния и динамика полости с продуктами детонации (при этом предполагается, что рассматриваемая среда безгранична);

поведение среды со свободными границами при взрывном нагружении, микроненормодности в жидкости и растягивающие напряжения;

течение жидкости с неизвестными свободными границами, высокоскоростные струйные течения при малоуглубленных подводных взрывах.

При этом все перечисленные выше направления связаны, прежде всего, с пониманием физики рассматриваемых явлений, поиском управляющих механизмов, разработкой экспериментальных исследований и созданием математических моделей, которые могли бы адекватно описывать эти высокоскоростные процессы и динамику их структуры.

В данной работе приведена реализация описания подводного взрыва путем создания пакета уникальных вычислительных программ, в основе которых лежит метод молекулярной динамики.

Общие сведения о подводном взрыве

Взрывом называется любой процесс быстрого превращения одного вида энергии в другой. Данный процесс характеризуется высокоскоростными изменениями в физическом и химическом состоянии среды, сопровождается практически мгновенным выделением тепла, увеличением давления и температуры, возникновением больших напряжений в среде, разрушением материа-

ла и неустановившимся движением среды. Химические среды, способные к превращениям такого рода, называют взрывчатыми веществами. Процессы, происходящие со скоростями порядка 1 км/с и выше, называют взрывными.

Ввиду сложности механизма энергетического превращения и его непредсказуемости в каждой конкретной ситуации, при постановке задач о взрывном процессе часто используются различные приближения и модельные представления [4], поскольку в общем случае распределение физических величин на поверхностях раздела произвольно. Именно существование поверхности раздела двух сред оказывается несовместимым с законами сохранения массы, количества движения и энергии. Происходит мгновенный распад начальной поверхности с образованием новых поверхностей. На каждой из этих поверхностей разрыва такие гидродинамические переменные, как давление, плотность, температура и скорости частиц, меняются скачкообразно. Нестационарная поверхность сильного разрыва, которая распространяется по окружающей среде, носит название «фронт ударной волны»; поверхность, разделяющая продукты взрыва и среду, является поверхностью сильного разрыва (ее называют поверхностью «газового пузыря»).

Таким образом, теоретические исследования касались, в основном, изучения неустановившегося движения жидкости между граничными поверхностями: фронтом ударной волны, поверхностью газового пузыря и продуктами детонации взрывчатых веществ [5 – 7]. В данной работе затрагиваются такие аспекты, как образование ударной волны [8] и развитие образовавшегося при этом пузыря [9].

Метод молекулярной динамики

Молекулярная динамика является одним из современных методов компьютерного моделирования, в котором для изучения поведения системы с течением времени используется классическая механика. Применение метода молекулярной динамики включает численное решение следующей системы уравнений:

$$m_i \ddot{x}_i = F_i; \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

Интегрирование второго закона Ньютона с помощью различных схем от простейших методов Эйлера первого порядка до схем предиктор-корректор позволяет определять траектории атомов. Наиболее важные требования, налагаемые на такие схемы, — это устойчивость, точность и высокая скорость работы. Сила F_i , действующая на i -ю частицу, определяется как отрицательная производная потенциальной энергии U :

$$F_i = - \frac{\partial U(x_1, \dots, x_N)}{\partial x_i}; \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

где N — число частиц.

Если заданы начальные координаты x_i и скорости частиц, то эволюция системы во времени зависит только от потенциала, который определяет взаимодействие между атомами.

Использованный в данной работе потенциал Леннард-Джонса [10 – 12] выражает простую модель парного взаимодействия неполярных молекул и описывает зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Эта модель хорошо описывает взаимодействие сферических неполярных молекул и поэтому используется в расчетах, а также при компьютерном моделировании.

Для получения траекторий атомов в пространстве и времени, существуют различные численные схемы решения системы классических уравнений движения: от простейших методов Эйлера первого порядка до схем предиктор-корректор высоких порядков точности [13]. В данной работе нами использован Метод Гира [14, 15] в представлении вектором Нордсика [16] шестого порядка точности. К преимуществам данного метода относятся его надежность и высокий порядок точности при относительно умеренных (по сравнению с другими методами) временных шагах.

Методика компьютерного моделирования

Изучаемая система представляет собой жидкость Леннард-Джонса в двумерном пространстве с периодическими или жесткими границами в продольном направлении

и стенкой на нижней границе. На частицы жидкости действует внешнее гравитационное поле в направлении, перпендикулярном поверхности жидкости. Параметры, использованные в потенциале Леннард-Джонса, соответствуют таковым для воды: $\sigma = 0,317$ нм, $\varepsilon = 0,6502$ кДж/моль.

Преыдушие компьютерные эксперименты, проведенные с водой [17, 18], показали, что структура ее молекулы сложнее, чем ранее предполагалось. Было найдено, что для правильного описания такого объекта необходимо использовать теорию зарядов связей, где в дополнение к межатомному взаимодействию следует учитывать электрическое взаимодействие между рядами ковалентных связей [19, 20]. Поскольку такой глобальный подход ведет к большим трудностям вычислительного плана и к усложнению модели, было решено построить более простую модель воды, заменив молекулу одной частицей. Взаимодействие таких частиц описывалось с помощью потенциала Леннард-Джонса, рассмотренного подробно в работе [21].

Проблема моделирования взрывчатого вещества представляет собой отдельную задачу. При исследовании плоских ударных волн в воде взрывчатку можно исключить. Вместо компьютерного моделирования на атомарном уровне сложная модель молекулы взрывчатки заменяется одной частицей.

В данной работе в круговую область заданного размера (с определенными координатами) помещалось известное количество частиц, подвергнутых равномерному сжатию. Вследствие изменения расстояния между частицами данная структура накапливает большое количество упругой энергии (рис. 1). В результате декомпрессии данной области частицы приобретают огромную скорость и, как следствие этого, высокую температуру. Таким образом осуществлялось моделирование взрыва. Данная методика нашла отражение и в других наших работах [22 – 25].

Результаты

Визуальные картины моделирования, полученные расчетным путем, позволили судить о внешнем сходстве полученных дан-

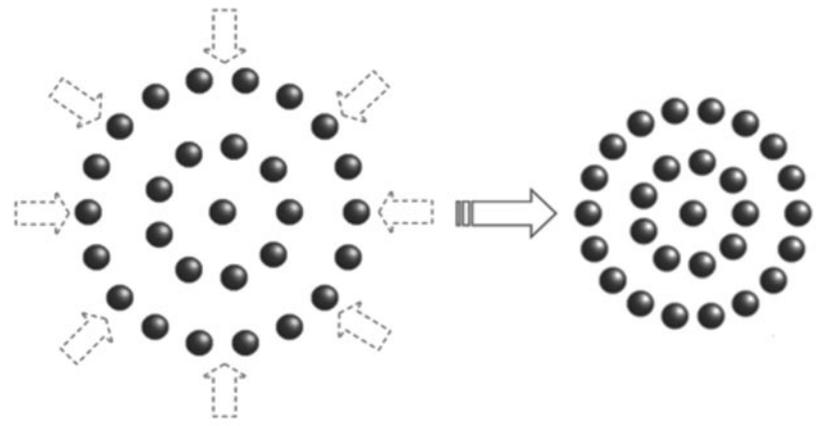


Рис. 1. Моделирование взрывчатки:
 ее сложные молекулы заменяются частицами в виде шариков; пунктирными стрелками показано воздействие сил всестороннего сжатия; сплошной стрелкой обозначен переход системы в новое состояние с высвобождением большой энергии

ных с известной последовательностью явлений, возникающих при подводном взрыве.

Приведенный далее расчет моделирует взрыв на мелкой воде. Эволюция данного процесса с течением безразмерного времени t' (значение $t' = 1$ соответствует моменту времени $t = 7,044$ пс) наглядно представле-

на на рис. 2, 3 и 4.

Момент времени $t' = 0$ отображает начало итерационного процесса с помещенным в моделируемую область зарядом, после установления состояния равновесия при температуре 300 К. Спустя 4 тыс. итерационных шагов при $t' = 1$ явно очерчивается

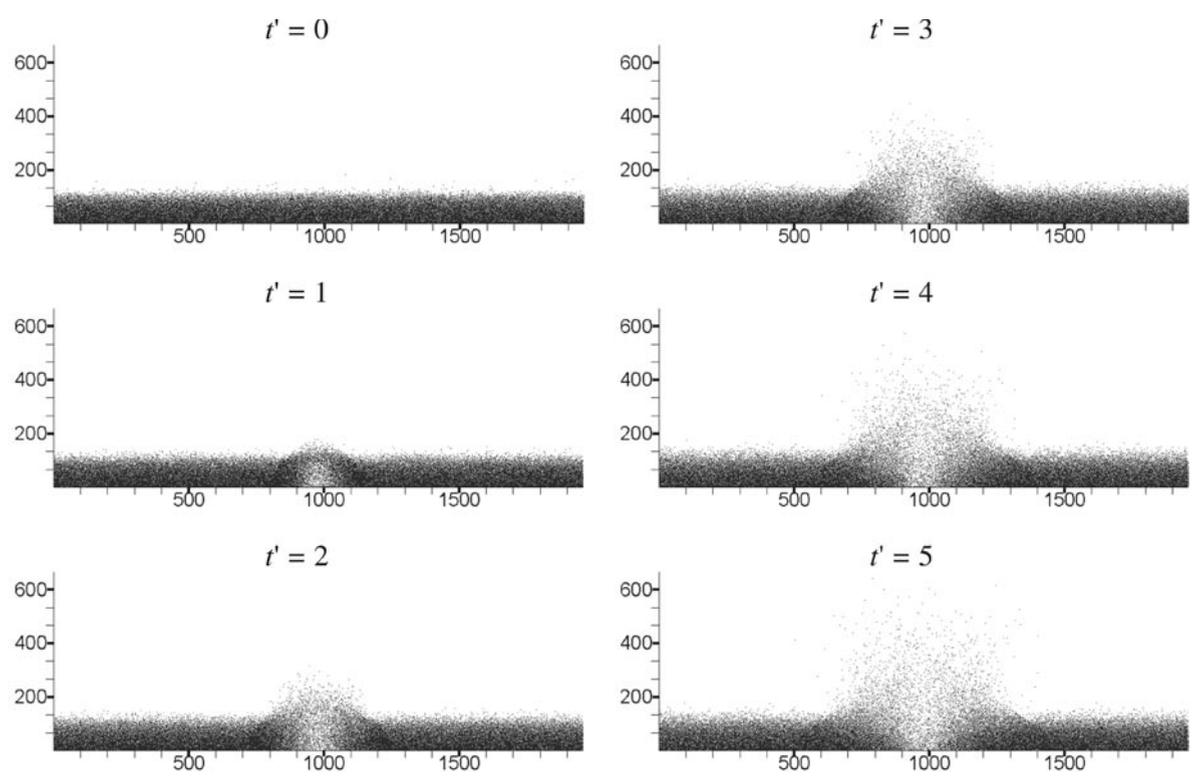


Рис. 2. Временная эволюция подводного взрыва при значениях безразмерного времени $t' = 0 - 5$. По обеим осям отложены координаты частиц (Å) в выбранной системе отсчета

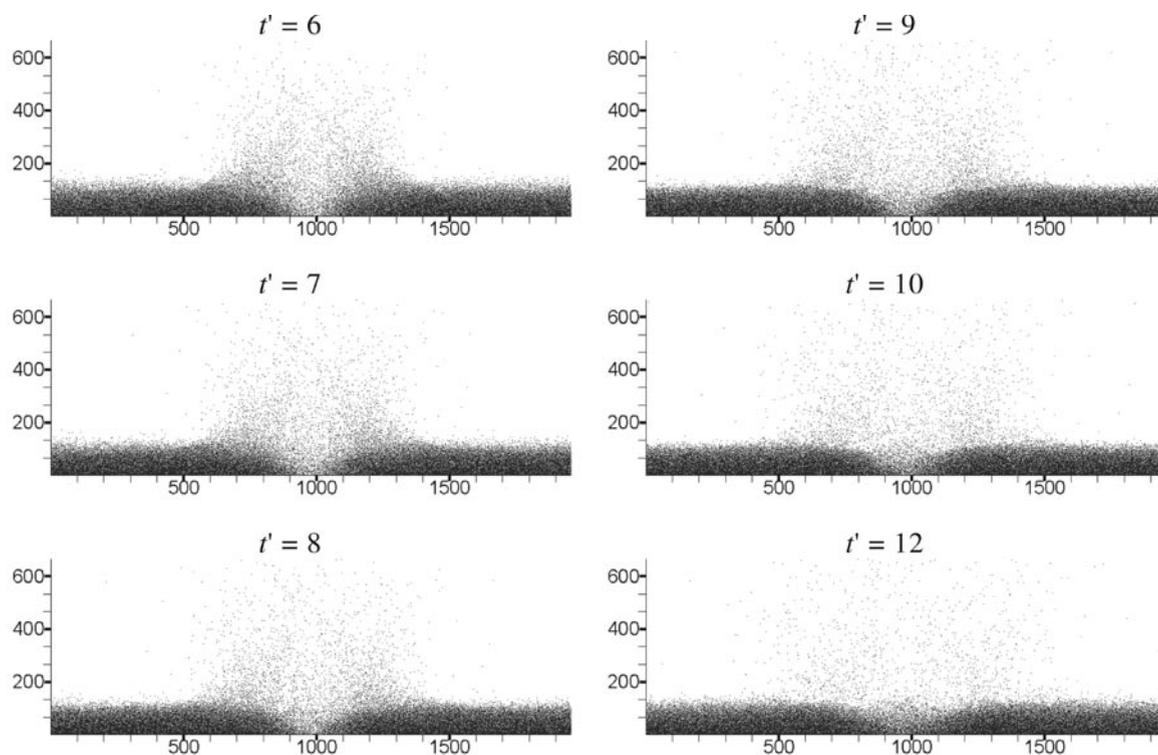


Рис. 3. Временная эволюция подводного взрыва при значениях безразмерного времени $t' = 6 - 12$. По обеим осям отложены координаты частиц (Å) в выбранной системе отсчета

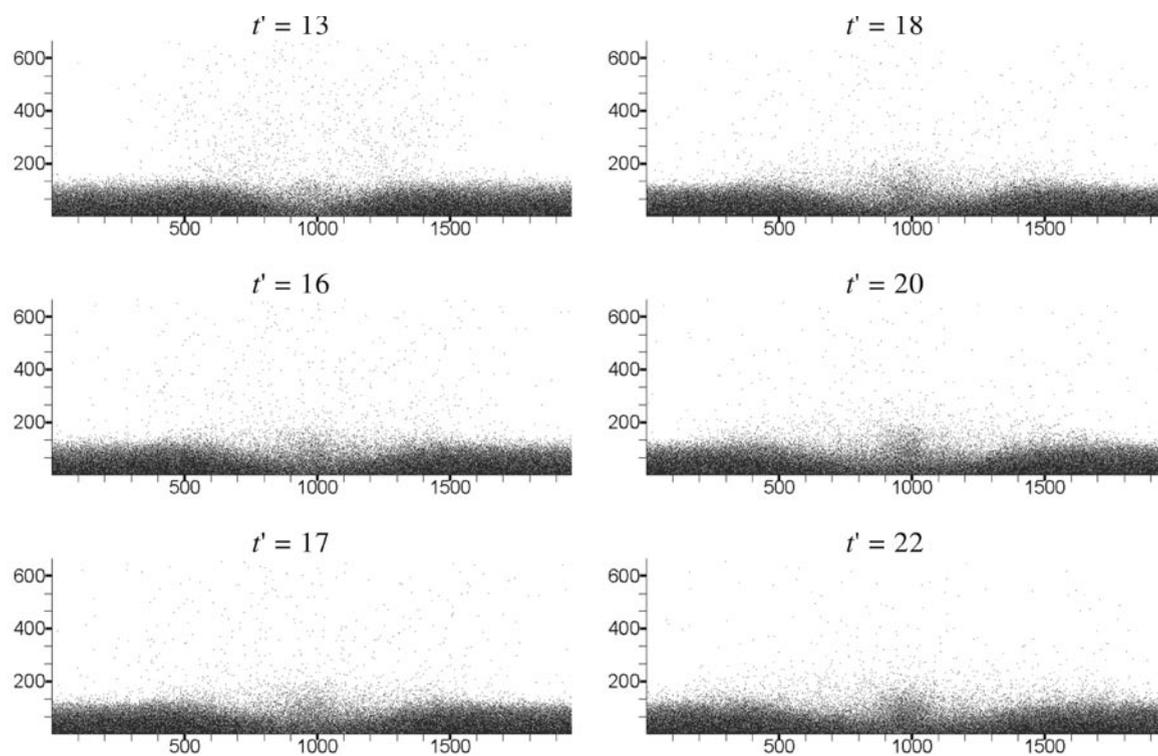


Рис. 4. Временная эволюция подводного взрыва при значениях безразмерного времени $t' = 13 - 22$. По обеим осям отложены координаты частиц (Å) в выбранной системе отсчета

контур расширения области, в которой произошёл взрыв. Расширение наблюдается до момента достижения данной областью поверхностного слоя, что примерно соответствует $t' = 2$. В интервале от момента $t' = 2$ и до $t' = 10$ наблюдается выброс поверхностного слоя частиц, выталкиваемых быстро расширяющейся областью, и образование кратера $t' = 2 - 10$.

С моментом времени $t' = 10$ связан также процесс отхода первых базисных волн в обе стороны от эпицентра. Далее кратер, образованный взрывом, начинает схлопываться, в результате чего в моменты $t' = 10 - 22$ появляется всплеск частиц над областью взрыва. В середине этого процесса, при $t' = 16 - 17$, частицы среды сдвигаются в сторону в продольном направлении, и образуются более сильные волны, достигающие уже края расчетной области после момента времени $t' = 22$.

Заключение

В результате проведенного исследования доказана применимость молекулярно-динамического подхода для изучения подводного взрыва. В рамках молекулярной динамики была разработана процедура, которая моделирует такой взрыв. Разработанная модель позволяет изучать развитие этого быстро протекающего процесса в двумерном пространстве, заполненном жидкостью Леннарда-Джонса. Проведенный расчет динамической структуры подводного взрыва обнаруживает поразительное сходство с известной эволюцией системы: распространение фронта ударной волны с последующим формированием кратера, затем распад ударной волны при достижении границ свободной поверхности и последующий подъем слоя воды над областью взрыва.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Николаевский В.Н. Подводные и подземные взрывы. М.: Мир, 1974. 416 с.
2. Кузнецов В.М. Математические модели взрывного дела. Новосибирск: Изд-во «Наука». Сибирское отделение, 1977. 262 с.
3. Кедринский В.К. Гидродинамика взрыва: эксперимент и модели. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. 434 с.
4. Седов Л.И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1977. 440 с.
5. Mader Ch.L. Compressible numerical calculations of underwater detonations (a report). Los Alamos Scientific Laboratory. LA-4594, 1971. 7 p.
6. Mader Ch.L. Detonations near the water surface (a report). LA-4958, UC-34, Los-Alamos, New Mexico, 87544, 1972. 30 p.
7. Sternberg H.M., Walker W.A. Calculated flow and energy distribution following underwater detonation of a pentolite sphere // Physics of Fluids. 1971. Vol. 14, No. 9, pp. 1869-1878.
8. Kot C.A. Intense underwater explosions // Astronautica Acta. 1972. Vol. 17, No. 4-5, pp. 421-433.
9. Pritchett J.W. Incompressible calculations of underwater explosion phenomena // Proc. Second Internat. Conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics. 1971, pp. 422-428.
10. Lennard-Jones J.E. On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas // Proc. Roy. Soc. London A. 1924. Vol. 106, pp. 463-477.
11. Lennard-Jones J.E., Ingham A.E. On the calculation of certain crystal potential constants, and on the cubic crystal of least potential energy // Proc. Roy. Soc. London A. 1925. Vol. 107, pp. 636-653.
12. Lennard-Jones J.E. Cohesion // Proceedings of the Physical Society. 1931. Vol. 43. No. 5, pp. 661-482.
13. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с.
14. Gear C.W The numerical integration of ordinary differential equations of various orders. Report ANL 7126, Argonne National Laboratory, 1966. 10 p.
15. Gear C.W Numerical initial value problems in ordinary differential equations. New Jersey: Englewoods Cliffs, Prentice-Hall, 1971. 253 p.
16. Nordsieck, A. On numerical integration of ordinary differential equations // Mathematics of Computation. 1962. Vol. 16, pp. 22-49.
17. Silvestrelli P.L., Parrinello M. Structural, electronic, and bonding properties of liquid water from first principles // J. Chem. Phys. 1999. Vol. 111, pp. 3572-3580.
18. Liem X.D., Tsun-Mei C. Molecular dynamics study of water clusters, liquid, and liquid-vapor interface of water with many-body potentials // J. Chem. Phys. 1997. Vol. 106. No. 19J, pp. 8149-8160.
19. Melker A.I., Vorobyeva M.A. Electronic theory of molecule vibrations // Proceedings of

SPIE. 2006. Vol. 6253:6253.05, pp. 1-15.

20. **Sharma M., Resta R., Car R.** Intermolecular dynamical charge fluctuations in water: a signature of the H-bond network // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. P. 187401.

21. **Melker A.I.** Potentials of interatomic interaction in molecular dynamics // *Reviews on Advanced Materials Science.* 2009. Vol. 20. No. 1, pp. 1-13.

22. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics of underwater explosion // *Proceedings of*

JSC'2010. 2010. P. 83.

23. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics approach to modeling of underwater explosion // *Proceedings of NDTCS-14.* 2011. P. 37.

24. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular hydrodynamics of underwater explosion // *Materials Physics and Mechanics.* 2012. Vol. 13. No. 2, pp. 147-156.

25. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Structure of shock waves in underwater explosion // *Proceedings of NDTCS-15.* 2013. P. 37.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ИГОЛКИН Сергей Игоревич – аспирант кафедры «Математика и естественнонаучные дисциплины» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
igolson@gmail.com

МЕЛЬКЕР Александр Иосифович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
newton@physics.spbstu.com

Igolkin S.I., Melker A.I. MOLECULAR HYDRODYNAMICS OF UNDERWATER EXPLOSION.

In this contribution we report on modeling underwater explosion in the framework of molecular dynamics. We have developed a computer program which allows studying the underwater explosion in two dimensional Lennard-Jones liquid. Calculations of the dynamical structure of underwater explosion displayed the striking resemblance of the underwater-explosion evolution obtained and the real process; namely, generation of a shock wave and its expanding; formation of a cavity; disintegrating the shock wave, when reaching a surface, into two parts which begin to move in the opposite direction parallel to the surface; transforming the cavity into a water crater of an arising water volcano; its activity and decay.

MOLECULAR DYNAMICS METHOD, SHOCK WAVE, UNDERWATER DISTURBANCE, LENNARD-JONES LIQUID, UNDERWATER EXPLOSION.

REFERENCES

1. **Nikolaevskiy V.N.** *Podvodnye i podzemnye vzryvy.* Moscow, Mir, 1974, 416 p. (rus)

2. **Kuznetsov V.M.** *Matematicheskie modeli vzryvnogo dela.* Novosibirsk, Nauka SO, 1977, 262 p. (rus)

3. **Kedrinskiy V.K.** *Gidrodinamika vzryva: eksperiment i modeli.* Novosibirsk, SO RAN, 2000, 434 p. (rus)

4. **Sedov L.I.** *Metody podobiya i razmernosti v mekhanike.* Moscow, Nauka, 1977, 440 p. (rus)

5. **Mader Ch.L.** *Compressible numerical calculations of underwater detonations.* Los Alamos Scientific Laboratory, LA-4594, 1971, 7 p.

6. **Mader Ch.L.** *Detonations near the water surface.* LA-4958, UC-34, Los-Alamos, New Mexico, 87544, 1972, 30 p.

7. **Sternberg H.M., Walker W.A.** Calculated flow and energy distribution following underwater detonation of a pentolite sphere. *Physics of Fluids*, 1971, Vol. 14, No. 9, pp. 1869-1878.

8. **Kot C.A.** Intense underwater explosions. *Astronautica Acta*, 1972, Vol. 17, No. 4-5, pp. 421-433.

9. **Pritchett J.W.** Incompressible calculations of underwater explosion phenomena. *Proc. Second Internat. Conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, 1971, pp. 422-428.

10. **Lennard-Jones J.E.** On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas. *Proc. Roy. Soc. London A*, 1924, Vol. 106, pp. 463-477.

11. **Lennard-Jones J.E., Ingham A.E.** On the

calculation of certain crystal potential constants, and on the cubic crystal of least potential energy. *Proc. Roy. Soc. London A*, 1925, Vol. 107, pp. 636-653.

12. **Lennard-Jones J.E.** Cohesion. *Proceedings of the Physical Society*, 1931, Vol. 43, No. 5, pp. 661-482.

13. **Samarskiy A.A., Gulin A.B.** *Chislennye metody*. Moscow, Nauka, 1989, 432 p. (rus)

14. **Gear C.W.** *The numerical integration of ordinary differential equations of various orders*. Report ANL 7126, Argonne National Laboratory, 1966. 10 p.

15. **Gear C.W.** *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. NJ, Prentice-Hall, Englewoods Cliffs, 1971, 253 p.

16. **Nordsieck A.** On numerical integration of ordinary differential equations. *Mathematics of Computation*, 1962, Vol. 16, pp. 22-49.

17. **Silvestrelli P.L., Parrinello M.** Structural, electronic, and bonding properties of liquid water from first principles. *J. Chem. Phys.*, 1999, Vol. 111, pp. 3572-3580.

18. **Liem X.D., Tsun-Mei C.** Molecular dynamics study of water clusters, liquid, and liquid-vapor interface of water with many-body

potentials. *J. Chem. Phys.*, 1997, Vol. 106, No. 19J, pp. 8149-8160.

19. **Melker A.I., Vorobyeva M.A.** Electronic theory of molecule vibrations. *Proceedings of SPIE*, 2006, Vol. 6253:6253.05, pp. 1-15.

20. **Sharma M., Resta R., Car R.** Intermolecular dynamical charge fluctuations in water: a signature of the H-bond network. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, Vol. 95. P. 187401.

21. **Melker A.I.** Potentials of interatomic interaction in molecular dynamics. *Reviews on Advanced Materials Science*, 2009, Vol. 20, No. 1, pp. 1-13.

22. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics of underwater explosion. *Proceedings of JSC'2010*, 2010, P. 83.

23. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular dynamics approach to modeling of underwater explosion. *Proceedings of NDTCS-14*, 2011, P. 37.

24. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Molecular hydrodynamics of underwater explosion. *Materials Physics and Mechanics*, 2012, Vol. 13, No. 2, pp. 147-156.

25. **Igolkin S.I., Melker A.I.** Structure of shock waves in underwater explosion. *Proceedings of NDTCS-15*, 2013, P. 37.

THE AUTHORS

IGOLKIN Sergei I.

St. Petersburg State Polytechnical University,
 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
 igolson@gmail.com

MELKER Alexander I.

St. Petersburg State Polytechnical University,
 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
 newton@physics.spbstu.com