

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КИНЕТИКИ АРРЕНИУСА ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОХОЖДЕНИЯ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ НА БОЛЬШИЕ РАССТОЯНИЯ

Ю. В. Бабанова, Д. В. Мокин, Б. Н. Шамраев

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Широко распространенным способом численно-го моделирования нормальной детонации твердых ВВ в газодинамических методиках является метод навязанного энерговыделения с контролем скорости фронта волны [1, 2]. Суть различных модификаций этого метода состоит в замене процесса горения ВВ на фронте детонационной волны заданным явно источником тепловой энергии нулевой толщины, бегущим по газу с заданной массовой скоростью, соответствующей скорости детонационной волны. На практике метод контроля фронта обычно дополняется описанием реальной кинетики, например по закону Аррениуса.

Такой подход дает приемлемые результаты, пока ширина фронта волны в расчетах сопоставима с размером реальной зоны горения. Ситуация меняется при использовании мелких сеток. На рис. 1 приведен типичный дефект профилей давления, наблюдаемый в плоских расчетах с реальными уравнениями состояния ВВ и ПВ.

В случае кинетики навязанного энерговыделения, как видно из рис. 2, имеет место отрыв фронта волны от зоны горения ВВ. А именно, горение ВВ происходит за фронтом волны.

В ряде случаев дефекты удается уменьшить использованием динамического контроля навязанного энерговыделения, предложенного Бондаренко Ю. А. [3, 4].

В стандартной кинетике навязанного энерговыделения задаются точки подрыва ВВ. Далее рассчитываются времена прохождения детонационной волны через узлы ячеек сетки. В каждой ячейке для четырех (узлов) моментов времени находятся два момента времени t_{\min} и t_{\max} , с помощью которых оценивается время $\tau_{\text{contr}} = t_{\max} - t_{\min}$ горения ВВ в ячейке. Изменение W массовой доли ВВ в ячейке при прохождении волны $t_{\min} < t^{n+1} \leq t_{\max}$ описывается уравнением

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{1}{\tau_{\text{contr}}}. \quad (1)$$

Такой подход дает приемлемые результаты моделирования на сетках с размером свыше 0,01 см, а именно тогда, когда ширина фронта волны в расчетах сопоставима с размером реальной зоны горения. При использовании более подробных сеток оценка времени горения ВВ в ячейке становится (~ несколько наносекунд, в пределе стремится к нулю) меньше

реального времени (~20–30 наносек) горения ВВ на фронте детонационной волны. В расчетах, как видно из рис. 1 и 2, возможно появление различных дефектов профилей величин, противоречащих физическим представлениям.

Известным средством устранения дефектов является использование комбинации кинетики навязанного энерговыделения с кинетикой Аррениуса

$$\frac{dW}{dt} = -WZ \exp\left(-\frac{\varepsilon_a}{\varepsilon}\right), \quad (2)$$

где ε – удельная внутренняя энергия, ε_a – энергия активации. Предэкспонент Z имеет смысл частоты колебаний по некоторой координате реакции или числу попыток совершить реакцию.

Переход вычислений с кинетики навязанного энерговыделения на кинетику Аррениуса позволяет с одной стороны замедлить («размазать» по времени) догорание ВВ за фронтом волны, с другой стороны существует обратная связь влияния газодинамики на энерговыделение.

Комбинация кинетики навязанного энерговыделения с кинетикой Аррениуса используется во многих методиках давно. При проведении стандартных расчетов на сетках размером 0,01÷0,03 см обычно используется значение $Z \sim 10^{10} \div 10^{12} \text{ с}^{-1}$. Как показала практика, при прохождении волны на большие расстояния (свыше 4 см) или при использовании подробных сеток требуется подбирать значения Z .

Для упрощения этой проблемы в методике МИМОЗА [5] на методических и производственных задачах была опробована кинетика Аррениуса с выбором значений предэкспонентом в виде

$$Z = \frac{k}{\tau_{\text{contr}}} \frac{h}{h_S}, \quad (3)$$

где h – характерный размер ячейки сетки, $h_S = 0,01$ см – шаг стандартной сетки, $k \sim 1$ – безразмерный параметр. Такая запись ориентирована на использование в расчетах лагранжево-эйлеровых сеток без пересчета времен τ_{contr} , когда характерный размер ячеек уменьшается в 1,5–2 раза. Эта модификация позволила устранить дефекты профилей величин, упомянутые выше. На рис. 3 приведены профили давления в задаче расчета сходящейся к центру детонационной волны со стандартным предэкспонентом и предэкспонентом (3).

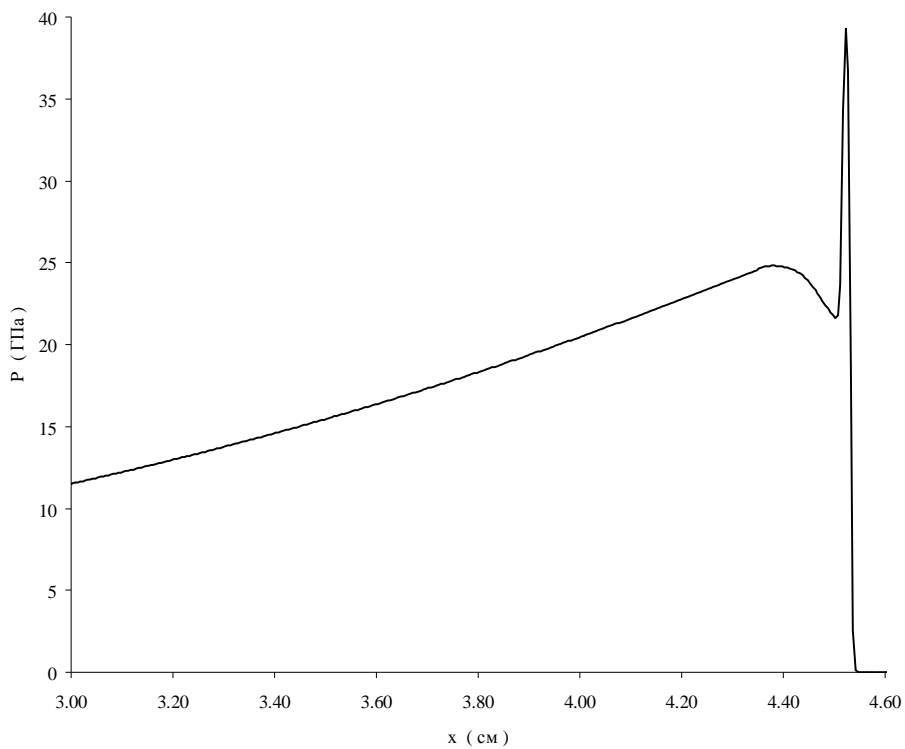


Рис. 1. Типичный дефект профиля давления волны в плоских расчетах

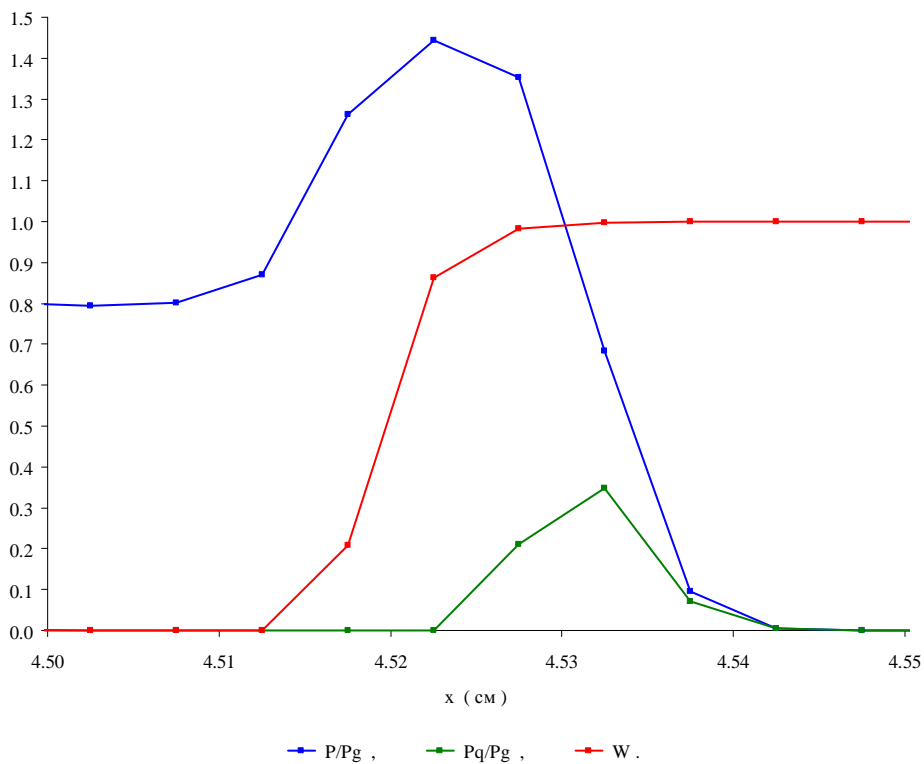


Рис. 2. Профили величин вблизи фронта волны: P – давление, Pq – вязкое давление, Pg – давление в точке Жуге, W – массовая доля ВВ

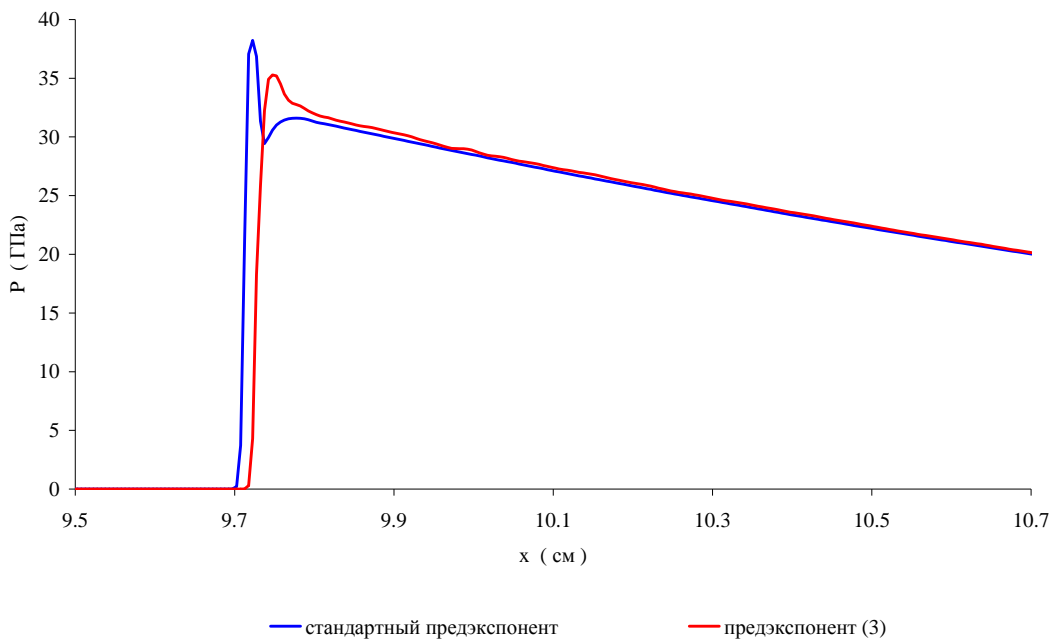


Рис. 3. Профили давления в задаче со сходящейся к центру детонационной волной

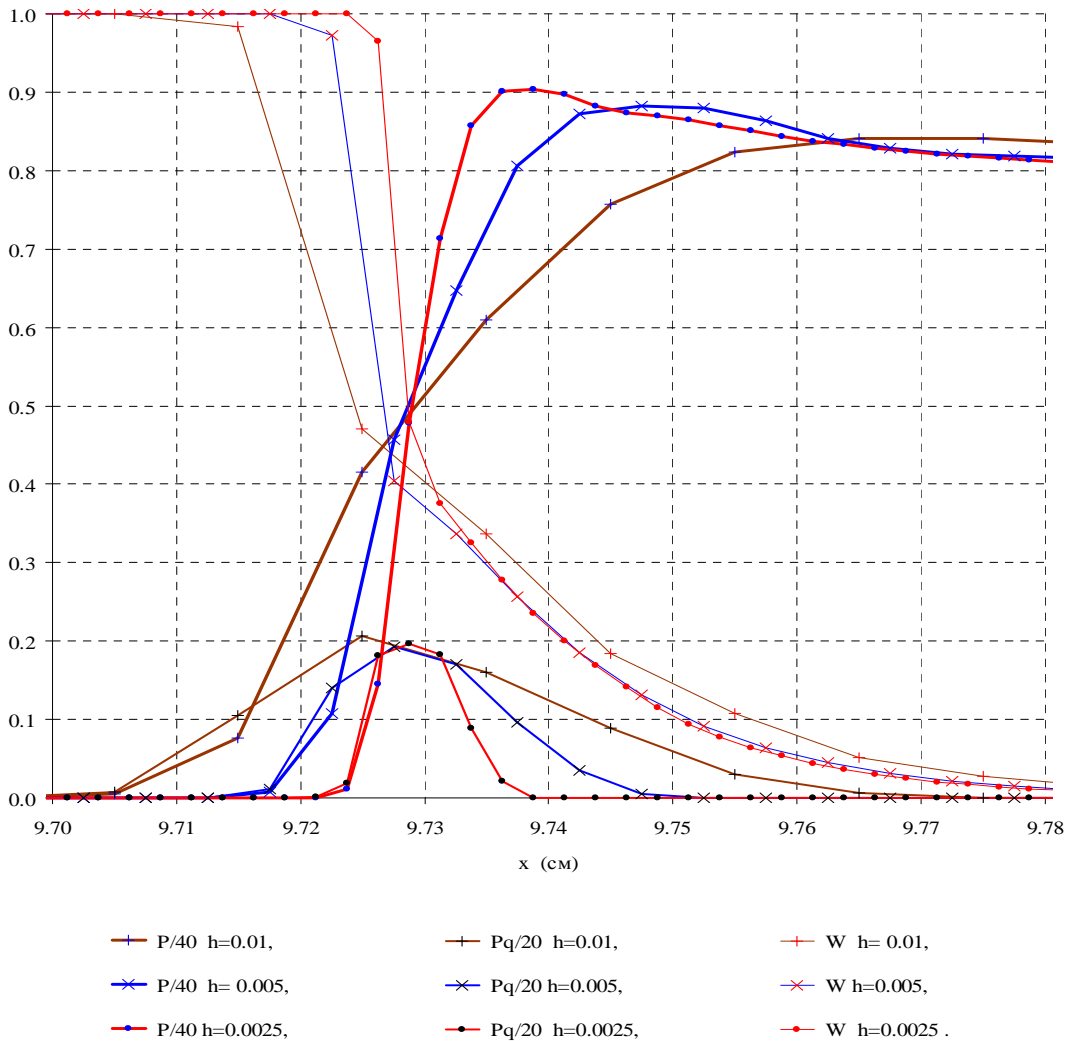


Рис. 4. Профили величин, полученные вблизи фронта волны в расчетах с $k = 2$ для двухкомпонентной модели смеси уравнений состояния ВВ и ПВ на эйлеровых сетках с шагами $h = 0,01, 0,005$ и $0,0025$ см

Более того, как видно из рис. 4, упростилось проведение расчетов на сходимость результатов.

Аналогичный подход был успешно опробован для устранения дефектов профилей величин за фронтом стационарной детонационной волны, моделируемой с помощью кинетики МК [6, 7], а именно, моделирование догорания «остатка» ВВ с помощью кинетики Аррениуса.

Для оценки времени догорания в модели МК использовалось соотношение

$$\tau_{contr} \approx h/D, \quad (4)$$

где D – скорость фронта детонационной волны. Это соотношение позволило переписать предэкспонент (3) в виде

$$Z = k \frac{D}{h_S}. \quad (5)$$

Значение параметра k при этом оказалось порядка 0,25.

Суммируя сказанное, при проведении расчетов на мелких сетках мы получаем запись предэкспонента в виде

$$Z = \frac{D}{L}, \quad (6)$$

где L – характерное расстояние, на котором протекают реакции горения. Хочется отметить, что для расчетов на эйлеровых сетках предэкспонент Z практически не зависит от размера ячеек.

Значения L меняются от 0,1 до 0,4 мм для комбинаций кинетики Аррениуса с другими кинетиками, опробованными в методике МИМОЗА. При этом эти значения сопоставимы с экспериментальными данными по зонам горения ВВ за фронтом детонационной волны [8–10].

Для интерпретации расстояния L можно воспользоваться результатами Позднякова А. В. [11], а именно, предложенной им формулой

$$D = Xcv. \quad (7)$$

для расчета скорости детонации. Здесь X – расстояние порядка диаметра молекулы, c – скорость света, v – волновое число колебаний молекулы. По этой формуле было получено хорошее согласие для нескольких десятков ВВ.

С точки зрения физической химии, в реакции горения на фронте детонационной волны принимает участие «комплекс» молекул. Вводя поправку на число молекул M в формуле Позднякова, приходим к соотношению вида

$$D = (MX) \left(\frac{cv}{M} \right). \quad (8)$$

Возможна достаточно простая физическая интерпретация предэкспонента в кинетике Аррениуса

$$Z = \frac{D}{L} = \frac{D}{MX} = \frac{cv}{M}, \quad (9)$$

а именно, L – характерный размер комплекса молекул, а Z – характерная частота колебаний в комплексе при детонации.

Понимание перечисленных факторов упрощает выбор значений предэкспонента. Это актуально для проведения численного моделирования прохождения детонационной волны на большие расстояния при использовании подробных сеток. Как уже говорилось выше, мы используем переход на кинетику Аррениуса при моделировании догорания ВВ с помощью кинетик навязанного энерговыделения и МК.

Литература

1. Бахрах С. М., Краснов Б. Н., Цыкин С. В., Шавердов С. А. Расчетное исследование перехода горения тэна во взрыв в рамках модели с выделенным фронтом горения // ФГВ. 1996. Т. 32, № 6. С. 96–107.
2. Бахрах С. М., Воронина Е. Б., Устинова Е. В., Шавердов С. А. Алгоритм расчета распространения фронта послыного горения, основанный на принципе Гюйгенса // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1998. Вып. 1. С. 59–65.
3. Бондаренко Ю. А. Свойства решений при счете нормальной детонации навязыванием энерговыделения с заданной скоростью фронта // Там же. 2009. Вып. 1. С. 3–18.
4. Бондаренко Ю. А. Влияние вязкости и дисперсии на допустимость скачков разрежения, возникающих на фронте энерговыделения, бегущего с заданной массовой скоростью // Там же. Вып. 2. С. 3–20.
5. Софронов И. Д., Афанасьева Е. А., Винокуров О. А. и др. Комплекс программ МИМОЗА для решения многомерных задач механики сплошной среды на ЭВМ Эльбрус-2 // Там же. 1990. Вып. 2. С. 3–9.
6. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Ольхов О. В. и др. Расчетное моделирование с опорой на эксперименты инициирования и развития детонации ВВ на основе ТАТБ с учетом десенсибилизации при взаимодействии ударной и детонационной волн: Препринт № 37. Арзамас-16: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1995.
7. Морозов В. Г., Карпенко И. И., Куратов С. Е. и др. Теоретическое обоснование феноменологической модели ударно-волновой чувствительности гетерогенного ВВ на основе ТАТБ с учетом одно- и двукратного ударно-волнового нагружения, в том числе с промежуточной разгрузкой // Химическая физика. 1995. Т. 14, № 2–3.
8. Utkin A. V., Mochalova V. M., Ananin A. A. Reaction Zone Structure for Pressed HE and Mixtures of High Explosives with Additions // 13th International Detonation Symposium, July 23–28th, 2006. P. 415–421.
9. Gorshkov M. M., Grebenkin K. F., Slobodenyukov V. M. et al. Shock-Induced Electro Conductivity of the Insensitive High Explosive TATB // Ibid. P. 435–444.
10. Grebenkin K. F., Taranik M. V., Zherebtsov A. L. Computer Modeling of Scale Effects at Heterogeneous HE Detonation // Ibid. P. 496–505.
11. Поздняков А. В. Вычисление скорости детонации // Физика горения и взрыва. 2002. Т. 38, № 3.