Explosionen

Physik fern des Gleichgewichts

Benjamin Blaß

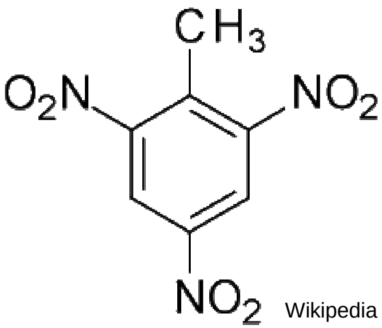
01.06.2011

Überblick

- Sprengstoffe
- Mathematische Formulierung
- Numerische Methoden I - Gitterbasierte Verfahren
- Ablauf einer Explosion
- Untersuchung der Mischungsschicht
  - Hydrodynamische Instabilitäten
  - Nachverbrennung
  - Zeitliche Entwicklung der Mischungsschicht
  - Durchgang der sekundären Schockwelle
- Numerische Methoden II - Gitterlose Verfahren

Sprengstoffe

- Trinitrotoluol (TNT)
- nach IUPAC 2-Methyl-1,3,5-trinitrobenzol
- Summenformel $C_7H_5N_3O_6$
- Strukturformel



Wikipedia

- thermobarer Sprengstoff (negative Sauerstoffbilanz)

$$2C_7H_5N_3O_6 \rightarrow 3N_2 + 5H_2O + 7CO + 7C$$

$$2C + O_2 \rightarrow 2CO$$

$$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$$

Mathematische Formulierung

Navier-Stokes-Gleichung [2]

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u_i\\ \rho E\\ \rho Y_k\end{bmatrix}+\frac{\partial}{\partial x_j}\begin{bmatrix}\rho u_j\\ \rho u_i u_j+p\delta_{ij}-\tau_{ij}\\ (\rho E+p)u_j-u_i\tau_{ji}+q_j\\ \rho Y_k\left(u_j+V_{j,k}\right)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 0\\ \dot{\omega}_k\end{bmatrix}-\frac{\eta}{x_j}\begin{bmatrix}\rho u_j\\ \rho u_j u_j\\ (\rho E+p)u_j\\ \rho Y_k u_j\end{bmatrix}$$

$$\eta=\begin{cases}0 & \text{, kartesich}\\ 1 & \text{, zylindrisch}\\ 2 & \text{, sphärisch}\end{cases}$$

ρ Dichte

u_i $i-$te Komponente der Geschwindigkeit

p Druck

$\tau_{ij}=\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$ Spannungstensor

μ Viskosität der Gasphase

$E=e+\frac{1}{2}u_i u_i$ spezifische Gesamtenergie

e innere Energie

$\dot{\omega}_k$ Erzeugungsrate der $k-$ten Spezies

$q_j=-\kappa\left(\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)+\rho\sum_{k=1}^{N_S}h_k Y_k V_{j,k}$ $j-$te Komponente des Wärmeflusses

κ thermische Leitfähigkeit

T Temperatur

N_S Anzahl der chemischen Spezies

h_k spezifische Enthalpie der $k-$ten Spezies

Y_k Massenanteil der $k-$ten Spezies

$V_{j,k}=-\frac{D_k}{Y_k}\left(\frac{\partial Y_k}{\partial x_j}\right)$ $j-$te Komponente der Diffusionsgeschwindigkeit für die $k-$te Spezies

D_k Diffusionskoeffizient der $k-$ten Spezies

Mathematische Formulierung

Zustandsgleichungen

- **Explosionsprodukte**

  Jones-Wilkins-Lee-Gleichung

$$p(\rho,e)=A\left[1-\frac{\omega\rho}{R_1\rho_0}\right]\exp\left(-\frac{R_1\rho_0}{\rho}\right)+B\left[1-\frac{\omega\rho}{R_2\rho_0}\right]\exp\left(-\frac{R_2\rho_0}{\rho}\right)+\omega\rho(e-e_0)$$

  $A, B, R_1, R_2, \rho_0, \omega$ Konstanten $\qquad e_0$ Referenzwert für innere Energie

- **Umgebungsluft**

  Van-der-Waals-Gleichung

$$\left(p+a\frac{n^2}{V^2}\right)(V-nb)=nRT$$

  a, b Konstanten $\quad n$ Molzahl $\quad V$ Gasvolumen

Numerische Methoden I
Gitterbasierte Verfahren

Klassische, gitterbasierte Methoden

- Euler-Formulierung
  - ➔ Bewegung des Fluids in einzelnen, unbewegten Punkten betrachtet
  - z. B. Finite-Differenzen-Methoden (FDM)
  - Schwierigkeiten bei der Erfassung freier Oberflächen oder sich bewegender Grenzflächen
- Lagrange-Formulierung
  - ➔ Bewegung einzelner, bewegter Partikel im Fluidgebiet betrachtet
  - z. B. Finite-Elemente-Methoden (FEM)
  - Probleme mit großen Deformationen

Numerische Methoden I
Gitterbasierte Verfahren

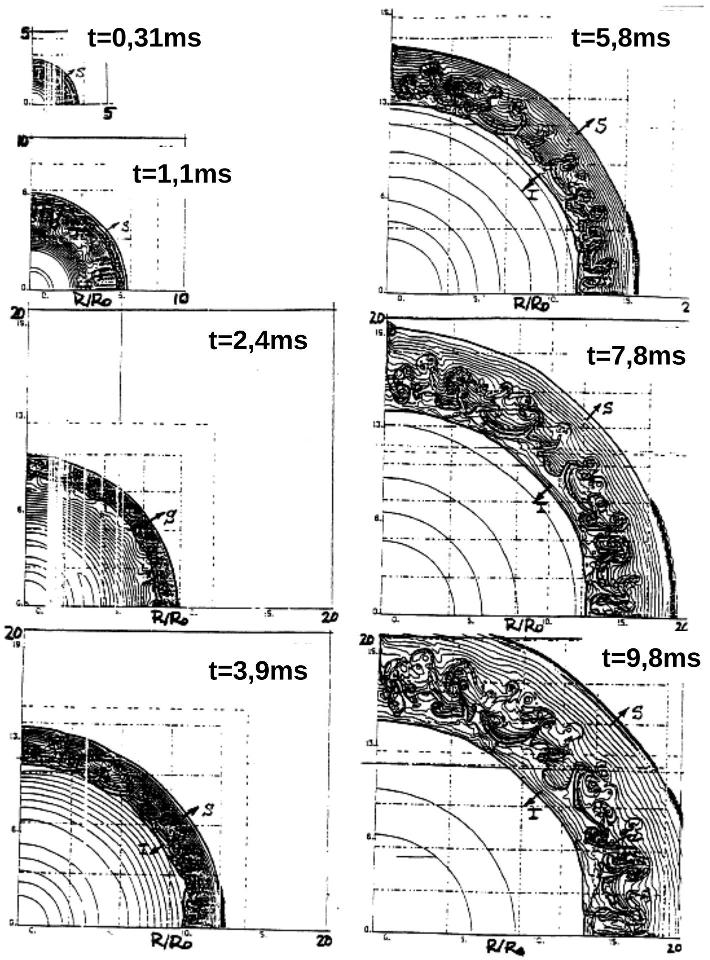
- Anwendung von **Hybridmethoden**, um sowohl Schockwellen als auch hydrodynamische Instabilitäten zu beschreiben
  - Fluss-Differenz-Splitting-Verfahren höherer Ordnung zur Beschreibung sich ausbreitender Schockwellen
    - ➔ splittet den Fluss in rechts- und linksgerichtete Fluktuationen des Mittelwertes benachbarter Gitterzellen auf
  - Mittelwertverfahren zur Beschreibung von Wirbeln und turbulenten Strukturen
    - ➔ Integration über einen Gitterzelle mit einem kleinen Zeitschritt, um Zeitentwicklung des Mittelwertes zu bestimmen

Numerische Methoden I
Gitterbasierte Verfahren

- Beschreibung chemischer Reaktionen: **Infinite Chemistry**
  - Annahme: chemische Reaktionen laufen instantan ab
  - Unterscheidung zwischen brennstoffreichen und brennstoffarmen Gitterzellen
    - ➔ in brennstoffreichen Zellen Konsum des gesamten Sauerstoffes
    - ➔ in brennstoffarmen Zellen Verbrennung des gesamten Brennstoffes
  - Bestimmung des verbleibenden Brennstoffes bzw. Sauerstoffes in einer Gitterzelle aus stöchiometrischen Überlegungen
  - ➔ „mischungsgesteuerte Verbrennung“

Ablauf einer Explosion

$\log(\rho)$



[1]

(i) Expansionsphase

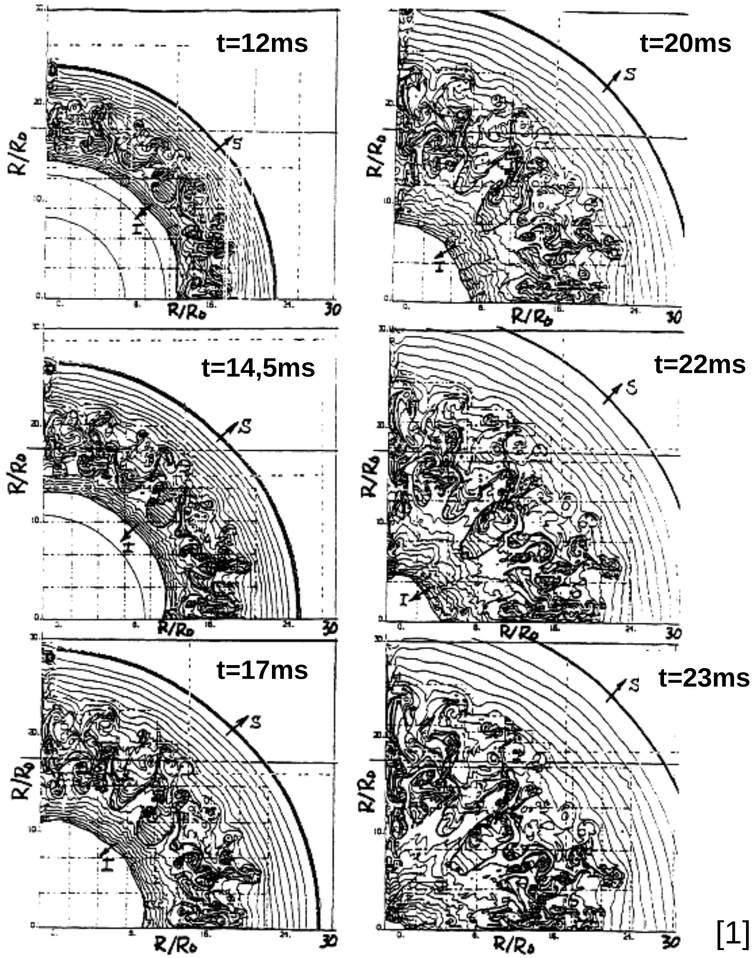
- Explosionsprodukte dehnen sich schnell aus $\left(\approx 9\,{}^{km}\!/\!_{s}\right)$
- Ausbildung nach außen laufender Schockwelle S und nach innen gerichteter Verdünnungswelle I, die mit Schockwelle nach außen getragen wird
- Grenzfläche des Feuerballs zwischen Schockwelle und Verdünnungswelle

Ablauf einer Explosion

- Grenzfläche des Feuerballs erfährt stoßartige Beschleunigung durch die Detonationswelle und wird nach außen getragen
  - ➔ stoßartige Beschleunigung der Grenzfläche kann Entstehung von *Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten* hervorrufen
- Feuerball wird während der Expansion durch komprimierte Umgebungsluft abgebremst
  - ➔ konstante Beschleunigung der Grenzfläche führt zur Ausbildung von *Rayleigh-Taylor-Instabilitäten*
- Instabilitäten rufen Scherflüsse hervor
  - ➔ Ausbildung von *Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten*
- Dichtegradienten und Druckverhältnisse an Grenzfläche
  - ➔ Wirbelbildung durch *baroklinen Effekt*

Ablauf einer Explosion

$\log(\rho)$



[1]

(ii) Implosionsphase

- Verdünnungswelle überwindet Bewegung nach außen und beginnt, nach innen zu laufen
- Ausweitung der inneren Grenzfläche der Mischungsschicht in Richtung des Ursprunges
- Vergrößerung der Ausdehnung der Mischungsschicht

Ablauf einer Explosion

(iii) Phase der zweiten Schockwelle

- Verdünnungswelle wird am Ursprung reflektiert
  - ➔ läuft als sekundäre Schockwelle nach außen
  - ➔ erzeugt weitere Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten
- Entstehung weiterer Schockwellen geringerer Stärke nach dem Muster der sekundären Schockwelle

(iv) Asymptotische Durchmischungsphase

- Ausdehnung der Mischungsschicht strebt langsam gegen einen asymptotischen Wert
- Explosionsgase und Umgebungsluft haben sich vermischt

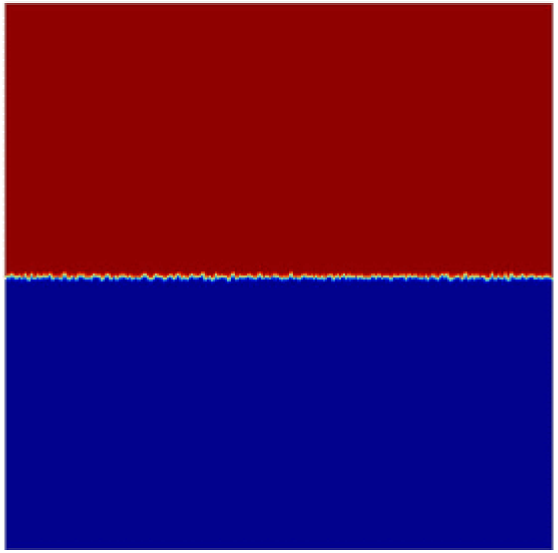
Untersuchung der Mischungsschicht
Hydrodynamische Instabilitäten

- hoher Dichtegradient an der Kontaktfläche zwischen Verbrennungsprodukten $\left(\rho \approx 2{,}5 \,{}^{g}\!/_{cm^3}\right)$ und der durch Druckwelle komprimierten Luft $\left(\rho \approx 0{,}01 \,{}^{g}\!/_{cm^3}\right)$
- Kontaktfläche instabil gegenüber:
  - konstanter Beschleunigung
    - ➔ Rayleigh-Taylor-Instabilitäten
  - stoßartiger Beschleunigung
    - ➔ Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten
  - barokliner Effekt (Nichtparallelität von Isothermen und Isobaren)
    - ➔ Wirbelbildung

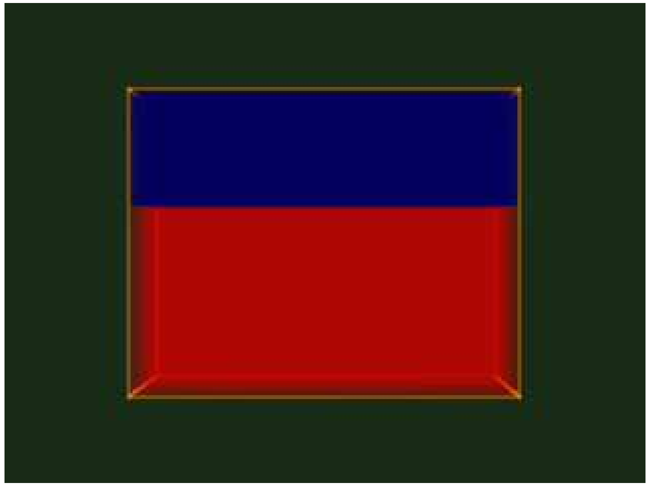
Untersuchung der Mischungsschicht
Hydrodynamische Instabilitäten

Rayleigh-Taylor-Instabilitäten

- entstehen durch die Dichtegradienten an der Grenzfläche zwischen den Explosionsprodukten und der Umgebungsluft



http://fluid.stanford.edu/~fringer/movies/shear_convect/shear.html

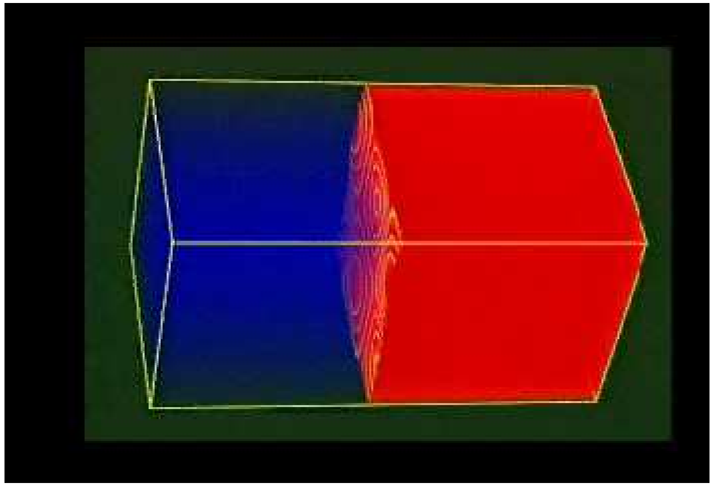


https://computation.llnl.gov/casc/asciturb/simulations.shtml

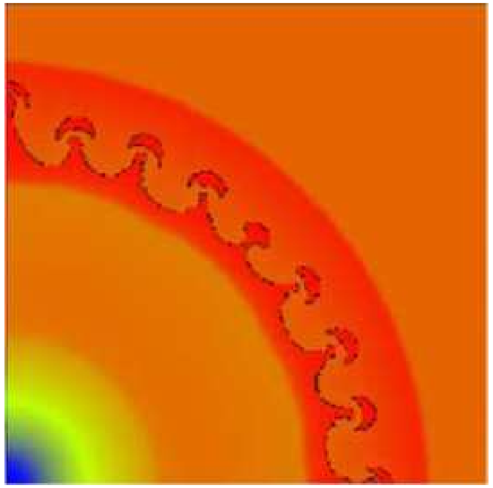
Untersuchung der Mischungsschicht
Hydrodynamische Instabilitäten

Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten

- entstehen bei Durchgang der Schockwellen durch die Grenz-fläche zwischen Verbrennungsgasen und komprimierter Luft



https://computation.llnl.gov/casc/asciturb/simulations.shtml

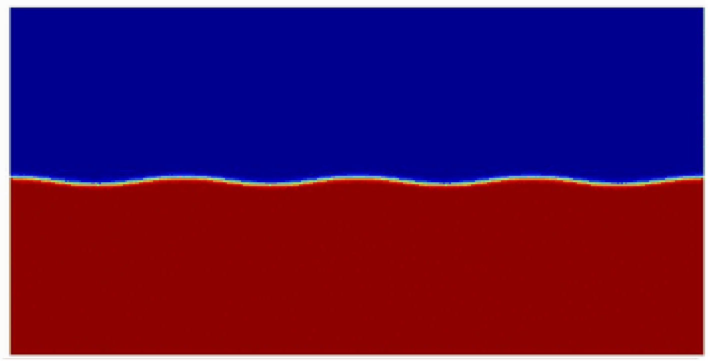


Spherical Richtmyer-Meshkov instability for axisymmetric flow
S. Dutta, J. Glimma, J. W. Grove, D. H. Sharp, Y. Zhang

Untersuchung der Mischungsschicht
Hydrodynamische Instabilitäten

Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten

- Anwachsen kleiner Störungen in der Scherschicht zweier Fluide mit unterschiedlicher Strömungsgeschwindigkeit



http://fluid.stanford.edu/~fringer/movies/shear_convect/shear.html

Untersuchung der Mischungsschicht
Hydrodynamische Instabilitäten

- Wachstumsrate der hydrodynamischen Instabilitäten entscheidend für den Durchmischungsprozess von Explosionsprodukten und Umgebungsluft
- Wachstum ausgehend von:
  - Rauigkeiten auf der Oberfläche der Sprengladung
  - molekularer Ebene
- in beiden Fällen Anwachsen der Instabilitäten auf makroskopische Größenordnung
- Ausbildung einer turbulenten Durchmischungsschicht
  - ➔ Durchmischung von Explosionsprodukten und Umgebungsluft
  - ➔ Nachverbrennung

Untersuchung der Mischungsschicht Nachverbrennung

- Mischung von Verbrennungsprodukten und Umgebungsluft an der Grenzfläche führt zu Verbrennung noch unverbrannter Anteile des Sprengstoffes bzw. weiterer Oxidation
- tritt auf für Sprengstoffe mit stark negativer Sauerstoffbilanz (thermobare Sprengstoffe)

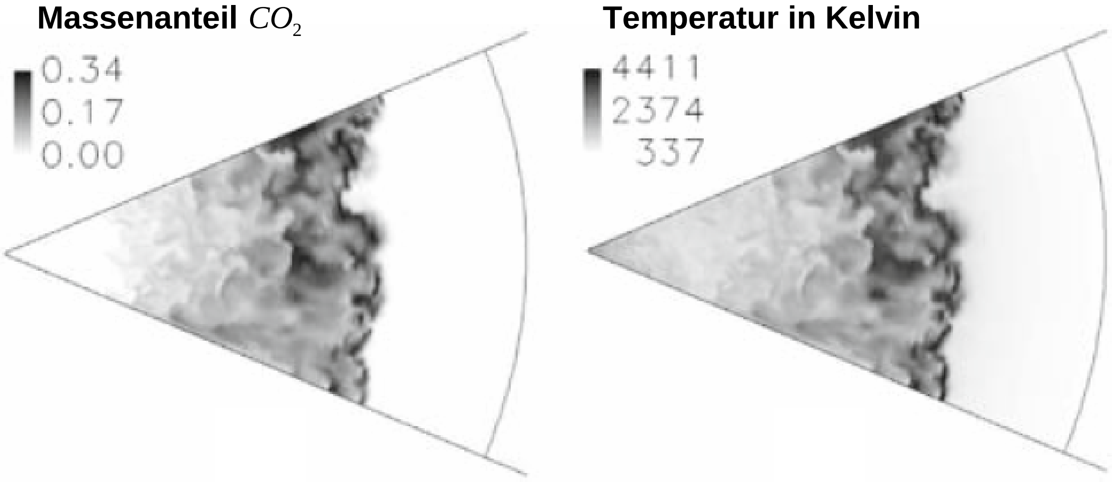
  z. B.: TNT

  $$2C + O_2 \rightarrow 2CO$$

  $$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$$
- kann erheblichen Anteil an der Schockwelle einer Explosion haben (bis zu 50%)

Untersuchung der Mischungsschicht
Nachverbrennung

t=3,2ms

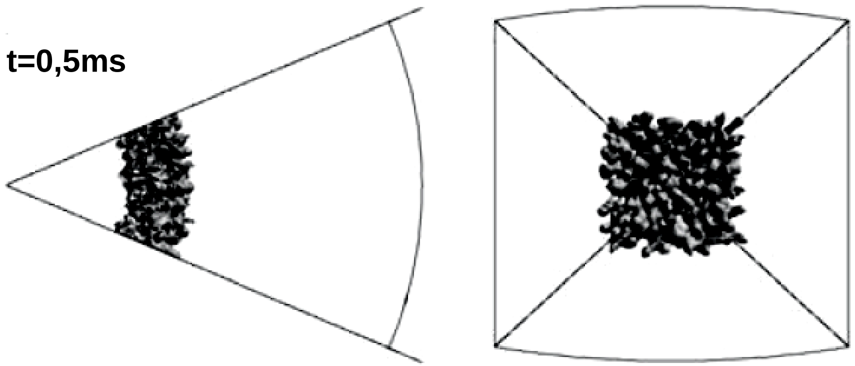


[2]

- Konzentration von CO_2 sowie Temperatur an der äußeren Grenzfläche der Mischungsschicht am größten
- CO_2 wirkt als Sperrschicht zwischen C und CO in den Explosionsprodukten und O_2 in der Umgebungsluft
  - ➔ Notwendigkeit turbulenter Durchmischung für Nachverbrennung

Untersuchung der Mischungsschicht
Zeitliche Entwicklung

Phase der ersten Druckwelle



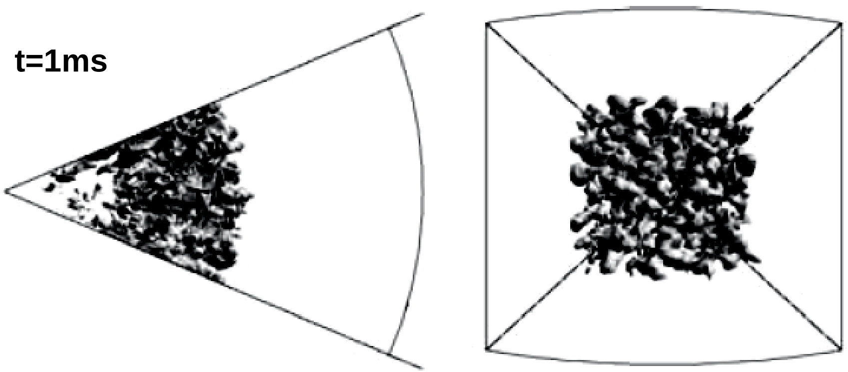
[2]

Oberflächen gleichen Massenanteils an N_2

- Entstehung der Mischungsschicht an der Grenzfläche der Detonationsprodukte und der verdichteten Luft
- zeitliches Wachstum der Störungen unter Beibehaltung ihrer initialen Form
- Wirbelbildung führt zu Einströmen von Luft in die Mischungsschicht
  - ➔ radiales Wachstum
  - ➔ Nachverbrennung

Untersuchung der Mischungsschicht
Zeitliche Entwicklung

Implosionsphase



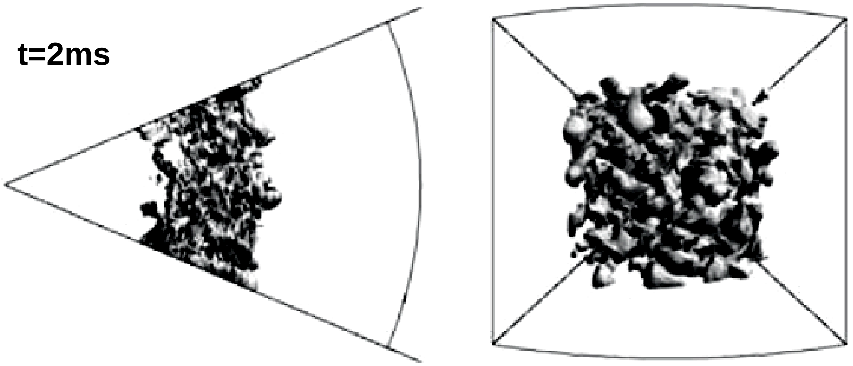
[2]

Oberflächen gleichen Massenanteils an N_2

- sekundäre Schockwelle implodiert nach innen
  - ➔ innere Grenzfläche der Mischungsschicht bewegt sich mit nach innen laufen-der Verdünnungswelle nach innen
  - ➔ Ausdehnung der Mischungsschicht

Untersuchung der Mischungsschicht
Zeitliche Entwicklung

Phase der zweiten Schockwelle



[2]

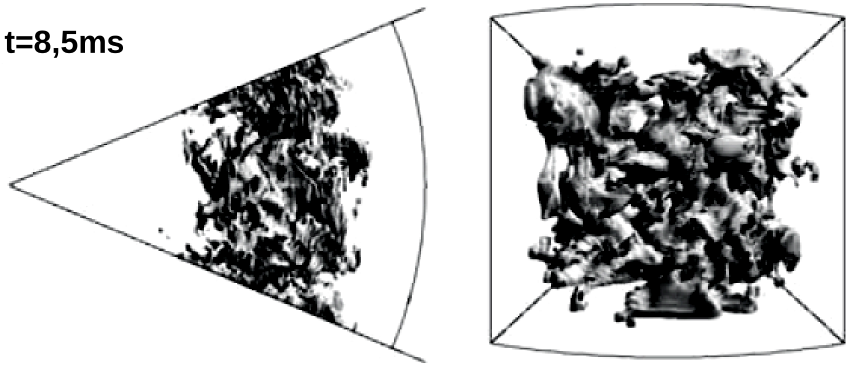
Oberflächen gleichen Massenanteils an N_2

- sekundäre Schockwelle durchläuft die Mischungs-schicht
  - ➔ Entstehung weiterer Richt-myer-Meshkov-Instabilitäten
  - ➔ Verstärkung der Wirbel-bildung durch baroklinen Effekt
  - ➔ Wechselwirkung zwischen benachbarten Strukturen
  - ➔ weitere Durchmischung von Explosionsgasen und Luft

Untersuchung der Mischungsschicht
Zeitliche Entwicklung

Asymptotische Phase

t=8,5ms

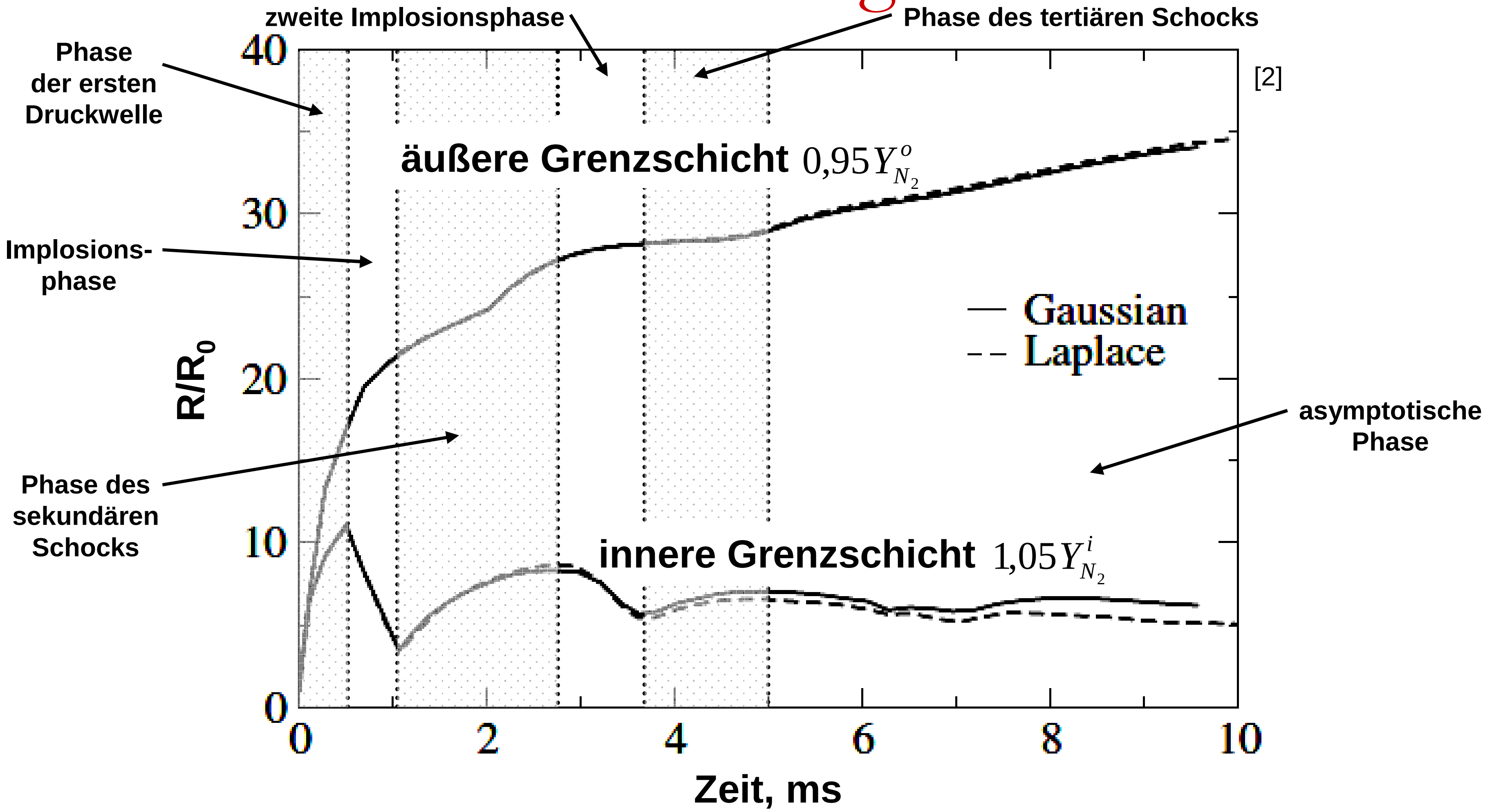


[2]

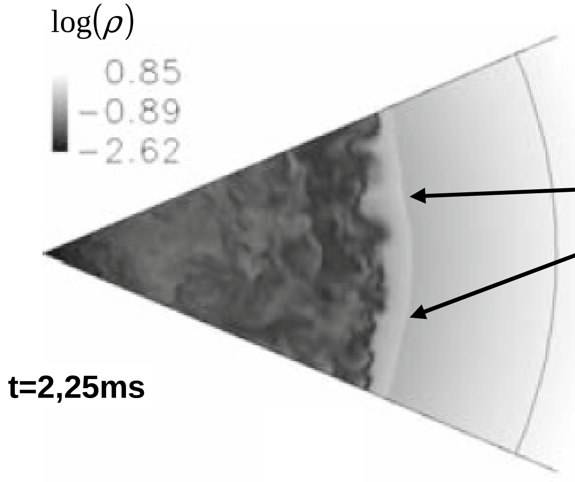
Oberflächen gleichen Massenanteils an N_2

- benachbarte Strukturen beginnen, sich miteinander zu vermischen
- verzerrteres Erscheinungs-bild der Mischungsschicht
- Verlust der Information über die ursprüngliche Gestalt der Störungen

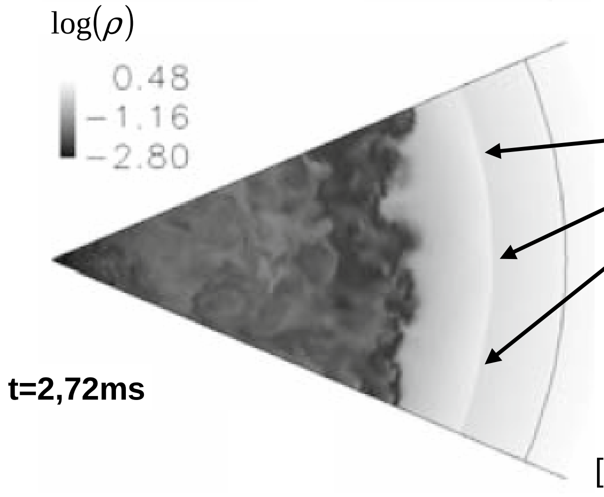
Untersuchung der Mischungsschicht
Zeitliche Entwicklung



Untersuchung der Mischungsschicht
Durchgang der sekundären Schockwelle



- Verzerrung der Form der Schockwelle innerhalb der Mischungsschicht



[2]

- Schockwelle gewinnt nach Durchlauf durch die Mischungsschicht ihre sphärische Form zurück

Untersuchung der Mischungsschicht Durchgang der sekundären Schockwelle

- sekundäre Schockwelle erzeugt beim Eintritt in die Mischungsschicht Richtmyer-Meshkov-Instabilitäten
  - ➔ Erzeugung von Wirbelstrukturen durch baroklinen Effekt
  - ➔ Wirbelstrukturen rufen räumlich variierende Grade von Nachverbrennung hervor
  - ➔ räumlich variierende Schallgeschwindigkeit innerhalb der Mischungszone
  - ➔ räumlich unterschiedliche Laufgeschwindigkeit der sekundären Schockwelle innerhalb der Mischungszone
  - ➔ Verzerrung der Form der Schockwelle
- außerhalb der Mischungszone keine Wirbelstrukturen
  - ➔ Schockwelle gewinnt ihre sphärische Form zurück

Numerische Methoden II
Gitterlose Verfahren

Methode der verschmierten Teilchen [3]

(Smoothed Particle Method, SPM)

- gitterloses Verfahren in Lagrange-Formulierung
- Darstellung des Fluids durch Teilchen, die Fluidgrößen wie Masse, Geschwindigkeits- und Ortsvektor tragen
- vereint Vorteile von Teilchenmethoden mit denen gitterloser Verfahren und Verfahren in Lagrange-Formulierung
- gut geeignet zur Behandlung
  - großer Deformationen
  - großer Inhomogenitäten
  - sich bewegender Grenzflächen

Numerische Methoden II
Gitterlose Verfahren

- **zentrale Aussage:**

  Der Wert einer Funktion f an einem Ort oder für eines der Teilchen sowie ihr Gradient können als Summationsinter-polierende über die benachbarten Teilchen unter Nutzung einer **Verschmierungs-Kernel-Funktion** W ausgedrückt werden mit der Verschmierungslänge h.

$$\langle f_i \rangle = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m_j}{\rho_j} \right) f_j W_{ij} \qquad W_{ij} = W\left(\vec{x}_i - \vec{x}_j, h\right) = W\left(\left|\vec{x}_i - \vec{x}_j\right|, h\right)$$

$$\langle \nabla f_i \rangle = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{m_j}{\rho_j} \right) f_j \nabla_i W_{ij} \qquad \nabla_i W_{ij} = \frac{\vec{x}_i - \vec{x}_j}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{\vec{x}_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}}$$

Numerische Methoden II
Gitterlose Verfahren

- Anforderungen an die Kernel-Funktion
  - Normierungsbedingung

    $$\int d\vec{x}\, W(\vec{x}-\vec{x}', h) = 1$$

  - Delta-Funktions-Bedingung

    $$\lim_{h\to 0} W(\vec{x}-\vec{x}', h) = \delta(\vec{x}-\vec{x}') \text{ für } h \to 0$$

  - Kompaktheitsbedingung

    $$W(\vec{x}-\vec{x}', h) = 0 \text{ für } |\vec{x}-\vec{x}'| > \lambda h, \ \lambda \text{ Konstante}$$

- mögliche Kernel-Funktion: kubische Spline-Funktion (3d)

$$W(S,h) = \tfrac{3}{2}\pi h^3 \begin{cases} \frac{2}{3} - S^2 + \frac{1}{2} S^3 & 0 \le S < 1 \\ \frac{1}{6}(2-S)^3 & 1 \le S < 2 \\ 0 & S \ge 2 \end{cases} \quad \text{mit} \quad S = \frac{|\vec{x}-\vec{x}'|}{h}, \ \lambda = 2$$

Numerische Methoden II
Gitterlose Verfahren

- Einführung einer **künstlichen Viskosität**, um das numerische Modell zu stabilisieren, Eindringen der Teilchen ineinander zu verhindern und Schockwellen zu erfassen
- standardmäßig verwandte künstliche Viskosität:

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \dfrac{-\alpha \bar{c}_{ij}\mu_{ij} + \beta\mu_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}} & \vec{v}_{ij}\cdot\vec{x}_{ij} < 0 \\ 0 & \vec{v}_{ij}\cdot\vec{x}_{ij} \geq 0 \end{cases}$$

$$\mu_{ij} = \frac{h_{ij}\vec{v}_{ij}\cdot\vec{x}_{ij}}{\left|r_{ij}\right|^2 + \eta^2}\ ,\ \bar{c}_{ij} = \tfrac{1}{2}\left(c_i + c_j\right),\ \bar{\rho}_{ij} = \tfrac{1}{2}\left(\rho_i + \rho_j\right)$$

$$\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j\ ,\ h_{ij} = \tfrac{1}{2}\left(h_i + h_j\right)$$

α, β, η Konstanten

$\vec{v}$ Geschwindigkeitsvektor

c Schallgeschwindigkeit

Numerische Methoden II
Gitterlose Verfahren

- Bewegungsgleichungen

$$\begin{cases} \dfrac{d\rho_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N} m_j \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right) \cdot \nabla_i W_{ij} \\ \dfrac{d\vec{v}_i}{dt} = -\sum_{j=1}^{N} m_j \left(\dfrac{p_i}{\rho_i^2} + \dfrac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i W_{ij} \\ \dfrac{du_i}{dt} = \dfrac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} m_j \left(\dfrac{p_i}{\rho_i^2} + \dfrac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \left(\vec{v}_i - \vec{v}_j\right) \cdot \nabla_i W_{ij} \\ \dfrac{d\vec{x}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}$$

- Lösung der Bewegungsgleichungen mit Standardverfahren wie Leapfrog-, Prediktor-Korrektor- oder Runge-Kutta-Verfahren

Numerische Methoden II
Gitterlose Verfahren

- Verschmierungslänge von großer Bedeutung:
  - zu kleine Verschmierungslänge λh bedingt zu wenige Teilchen in der Umgebung eines betrachteten Teilchens, die Kräfte auf dieses ausüben
    - ➔ Verlust an Genauigkeit
  - zu große Verschmierungslänge λh führt zu Auswaschen von Einzelheiten für ein Teilchen bzw. lokaler Eigenschaften
    - ➔ Verlust an Genauigkeit

Referenzen

- *Mixing in Explosions [1]*

  A. L. Kuhl

  Technical Meeting at the Russian Academy of Sciences 1993
  http://www.osti.gov/bridge/servlets/purl/10143162-YGJKPX/native/10143162.pdf
- *Numerical study of blast characteristics from detonation of homogeneous explosives [2]*

  K. Balakrishnan, F. Genin, D. V. Nance and S. Menon

  Shock Waves (2010) 20 : 147-162
  https://ccse.lbl.gov/people/kaushik/papers/Balakrishnan_SW_2010.pdf
- *Computer simulation of high explosive explosion using smoothed particle hydrodynamics methodology*

  M. B. Liu, G. R. Liu, Z. Zong and K. Y. Lam

  Computer & Fluids 32 (2003) 305-322
  http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793001001050

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!