

文章编号: 1006-9941(2006)01-0016-05

散心爆轰数值模拟中人为粘性与空间步长的匹配关系

孙海权¹, 张文宏²

(1. 中国工程物理研究院研究生部, 北京 100088;

2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 应用 Lee-Tarver 反应率和 JWL 状态方程, 得到了散心爆轰数值模拟中人为粘性系数与空间步长之间的匹配关系: 距球心越近的计算单元, 其人为粘性系数应越大。远离球心处的计算单元, 其粘性系数接近一维平面情形。计算了炸药 PBX-9404 的球面散心爆轰过程, 结果表明, 利用所得人为粘性系数与空间步长之间的匹配关系, 可以得到符合散心爆轰波特性的结果。

关键词: 爆炸力学; 散心爆轰; 数值模拟; 人为粘性; 空间步长

中图分类号: TJ55; O347.5; O38

文献标识码: A

1 引言

近年来, 国内外的学者对点(或轴线)起爆的球(柱)面散心爆轰波问题进行了一定的研究^[1-5]。数值模拟爆轰传播时, 计算所得反应区宽度是反应速率和人为粘性系数的函数。定性来讲, 人为粘性越大, 反应区越宽。炸药化学反应区可以有不同的唯象处理方法, 可给反应度以不同的函数表达式, 如 Cochran 反应率, Forest Fire 反应率及 Lee-Tarver 反应率等等。为解决冲击波间断问题而引入的人为粘性又可以给出不同的表达式, 如冯·诺曼人为粘性, 朗特雪夫人为粘性^[1]等。这样, 由于选用的反应率函数及人为粘性的表达式不同, 在反应区便可得到不同的图像。即使应用同一反应率函数及人为粘性, 由于计算条件不同(如人为粘性系数), 也可能给出不同的数值模拟结果。所以, 在反应率函数、状态方程、空间步长和人为粘性之间必须满足一定的匹配关系才可能给出合理的模拟结果。关于一维平面定常爆轰波的数值模拟, 已经有许多文献报道^[6-8]。而对于散心爆轰的数值模拟, 这方面的讨论则较少。

对于凝聚炸药, 其化学反应区一般都很窄。为了得到合理地爆轰过程, 就必须在反应区内布置足够的网格。这就使得计算量大大增加, 特别是对尺寸较大的爆轰装置。所以, 近年来发展了网格自适应方法, DSD(Detonation Shock Dynamics)方法等, 但其程序编制均有一定难度。在工程应用中, 人们最关心的是爆

轰波 CJ 点或声速点之后的状态, 对很窄的反应区内的细节可以不予考虑。所以, 本文采用 Lee-Tarver 反应率函数和 JWL 状态方程, 以及文献[9]的差分格式对散心爆轰的数值模拟进行了研究, 给出了散心爆轰数值模拟中人为粘性系数与空间步长的匹配关系, 在较粗的网格下, 得到了合理的结果。

2 散心爆轰波的不定常性质

由定性分析^[9-11]知道, 散心爆轰波阵面有一定的曲率半径, 在其传播过程中必然出现面积效应, 从而导致爆压和爆速的下降。随着传播距离的增加, 爆轰波阵面曲率半径增大, 面积效应相应减小, 爆速、爆压逐渐增加而接近平面爆轰波。根据流管理论^[11], 在波面半径 R 远大于炸药反应区宽度 l , 即 $R \gg l$, 球面散心爆轰波中爆速与波面半径之间的关系在 $R \gg l$ 时可近似表示为:

$$\frac{D}{D_{CJ}} = 1 - \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{l}{R} \quad (1)$$

式中, D_{CJ} 为平面 CJ 爆速; γ 为爆轰产物的多方指数; l 为炸药的化学反应区宽度; R 为波面曲率半径。

文献[5]给出了不同爆速下声速点反应度的表达式

$$F = D^2 / [2(\gamma^2 - 1)Q] \quad (2)$$

式中, Q 为炸药化学反应释放能。

3 散心爆轰中反应度 F 和密度比 Φ 之间的关系

当爆轰波曲率半径 R 远大于反应区宽度时(如 $R > 0.5$ cm), 为了得到散心爆轰中人为粘性系数和空间步长之间的匹配关系, 就必须首先得到反应度 F 与密度比 Φ 之间的关系。以下给出主要的推导过程:

收稿日期: 2005-04-06; 修回日期: 2005-06-13

作者简介: 孙海权(1978-), 男, 硕士, 从事爆轰理论研究。

e-mail: sunjqun@hotmail.com

一维定常流体力学方程组的积分形式可写为：

$$\begin{cases} \rho u = \rho_{00} u_{00} \\ p + q + \rho u^2 = \rho_{00} + \rho_{00} u_{00}^2 \\ e + (p + q)v + \frac{u^2}{2} = p_{00} v_{00} + e_{00} + \frac{u_{00}^2}{2} \end{cases} \quad (3)$$

式中, ρ, u, p, e, v, q 分别表示反应区内任一点的密度, 速度, 压力, 比内能, 比体积及人为粘性压力, 下标“00”表示预压冲击波后的物理量, 根据冲击波关系式可以表示为波前物理量, “0”表示波前物理量。

$$\begin{cases} \rho u = \rho_0 D \\ q + q + \rho u^2 = p_0 + \rho_0 D^2 \\ e + (p + q)v + \frac{u^2}{2} = p_0 v_0 + e_0 + \frac{D^2}{2} \end{cases} \quad (4)$$

由(4)式中第二、三式得到的表达式为

$$q = p_0 - p + \rho_0 D^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) \quad (5)$$

$$q = -p + \rho(e_0 - e) + \frac{\rho D^2}{2} \left(1 - \frac{\rho_0^2}{\rho^2}\right) + p_0 v_0 \rho \quad (6)$$

人为粘性在一维, 二维计算程序中表示为

$$q = \begin{cases} 0 & \left(\frac{\partial u}{\partial R}\right) \geq 0 \\ \left(\frac{l^2 v}{v_0^2}\right) \left(\frac{\partial u}{\partial R}\right)^2 & \left(\frac{\partial u}{\partial R}\right) < 0 \end{cases} \quad (7)$$

其中 l 满足

$$l = a \times \Delta R / \Phi \quad (8)$$

a 是人为给定的人为粘性系数, ΔR 为计算网格尺寸, Φ 为密度比

$$\Phi = \frac{\rho_0}{\rho} \quad (9)$$

由(4)式可得到

$$e - e_0 = \frac{D^2}{2} \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right)^2 + p_0 (v_0 - v) \quad (10)$$

目前, 应用比较广泛的燃烧模型为点火成长模型, 其表达式^[1]为:

$$\lambda = I(1 - F)^{2/9} \zeta^4 + G(1 - F)^{2/9} F^{2/3} p^Z \quad (11)$$

其中

$$\lambda = \frac{dF}{dt}, \zeta = \frac{v_0}{v_e} - 1 \quad (12)$$

这里 I, G, Z 均为常数(见表 1), v_e 为受冲击后但尚未

反应炸药的比容。

$$\frac{\partial u}{\partial R} = \frac{\partial u}{\partial F} \frac{\partial F}{\partial R} = \frac{\partial u}{\partial F} \left(\frac{1}{u} \frac{\partial F}{\partial t}\right) = \frac{\partial u}{\partial F} \left(\frac{\lambda}{u}\right) \quad (13)$$

表 1 Lee-Tarver 反应率方程参数

Table 1 Parameters of Lee-Tarver's reaction rate

explosive	I	G	Z
PBX-9404	44	200	1.6

由(4)中第一式有

$$\frac{du}{dF} = D \frac{d\Phi}{dF} \quad (14)$$

结合式(5)、(7)式及 Lee-Tarver 反应率方程表达式, 可得

$$\left(\frac{d\Phi}{dF}\right)^2 = \frac{v_0 \Phi^3 [p_0 - p + \rho_0 D^2 (1 - \Phi)]}{a^2 \Delta R^2 [I(1 - F)^{2/9} \zeta^4 + G(1 - F)^{2/9} F^{2/3} p^Z]^2} \quad (15)$$

求解此式即可得到反应度 F 和密度比 Φ 之间的关系。式中, p 为 F 和 Φ 的函数, 所以, 只要给定 $a\Delta R$ 的值, 即可数值求解。下面给出压力 p 的求解方法。

未反应炸药和爆轰产物都采用 JWL 状态方程, 在反应区内, 假定炸药和产物的压力、温度平衡, 比容及比内能则按照爆轰产物的质量分数 F 进行分配, 即:

$$\begin{cases} \Phi = (1 - F)\Phi_s + F\Phi_g \\ E = (1 - F)E_s + FE_g - FQ \\ p_s = p_g = p \\ T_s = T_g = T \end{cases} \quad (16)$$

这里 E 为单位初始体积的内能。下标“s”表示未反应的炸药; 下标“g”表示炸药产物; Q 为炸药化学反应释放能。JWL 状态方程为:

$$\begin{cases} p_s = A_s e^{-R_{s1}\Phi_s} + B_s e^{-R_{s2}\Phi_s} + \frac{\omega_s}{\Phi_s} C v_s T_s \\ p_g = A_g e^{-R_{g1}\Phi_g} + B_g e^{-R_{g2}\Phi_g} + \frac{\omega_g}{\Phi_g} C v_g T_g \\ E_s = \frac{A_s}{R_{s1}} e^{-R_{s1}\Phi_s} + \frac{B_s}{R_{s2}} e^{-R_{s2}\Phi_s} + C v_s T_s \\ E_g = \frac{A_g}{R_{g1}} e^{-R_{g1}\Phi_g} + \frac{B_g}{R_{g2}} e^{-R_{g2}\Phi_g} + C v_g T_g \end{cases} \quad (17)$$

这里 $A, B, R_1, R_2, \omega, C, v, \rho_0 = 1.84 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 均为常数(见表 2)。

表2 PBX-9404 炸药 JWL 状态方程参数

Table 2 Parameters of JWL equation of state for PBX-9404

	A/MPa	B/MPa	R ₁	R ₂	ω	C _v /(MPa/K)
explosive	69.69	-1.727	7.8	3.9	0.8578	2.505 × 10 ⁻⁵
product	8.524	0.1802	4.55	1.3	0.38	1 × 10 ⁻⁵

$$[A_s e^{-R_{s1}\Phi_s} + B_s e^{-R_{s2}\Phi_s}] - [A_g e^{-R_{g1}\Phi_g} + B_g e^{-R_{g2}\Phi_g}] - \left[\frac{\omega_g}{\Phi_g} C_{v_g} - \frac{\omega_s}{\Phi_s} C_{v_s} \right] \frac{1}{\eta} \left\{ E + FQ - (1-F) \left[\frac{A_s}{R_{s1}} e^{-R_{s1}\Phi_s} + \frac{B_s}{R_{s2}} e^{-R_{s2}\Phi_s} \right] - F \left[\frac{A_g}{R_{g1}} e^{-R_{g1}\Phi_g} + \frac{B_g}{R_{g2}} e^{-R_{g2}\Phi_g} \right] \right\} = 0 \quad (18)$$

在(16)第一式及(18)式中,只有 Φ_s 和 Φ_g 为未知量。给定 Φ, F , 即可用数值方法求得 Φ_s 和 Φ_g , 从而进一步求得压力 p 。

对某一给定爆轰波曲率半径,爆速 D 可由(1)式求得。从而可采用龙格-库塔法求解常微分方程(15)式,所得结果见下文。

以上是考虑人为粘性时所得到的 $F \sim \Phi$ 之间的关系曲线,在不考虑人为粘性时,也可以求得 $F \sim \Phi$ 的关系曲线,此线也就是 $F \sim \Phi$ 平面上的 Rayleigh 线。

不考虑人为粘性,即 $q=0$, 此时(5)式变为:

$$p = p_0 + \rho_0 D^2 (1 - \Phi) \quad (19)$$

对某一给定 Φ 值,利用数值方法求反应度 F ,使得用上式及 JWL 状态方程得出的压力相等。这样就可求得不考虑人为粘性时 $F \sim \Phi$ 之间的关系(见图1)。

4 人为粘性与空间步长的匹配关系

当不考虑人为粘性时, $F \sim \Phi$ 平面上的 Rayleigh 线为曲线;对于散心爆轰波,由于面积效应,随爆轰波曲率半径的变化,其爆速也要发生相应的变化,所以不同波面半径处的 Rayleigh 线也不同(见图1)。从图1还可以看出,在散心爆轰中,声速点处的反应度小于1,即在声速点,化学反应并未完全结束。不同曲率半径所对应的声速点处的反应度不同^[5,11]。当考虑人为粘性后, Rayleigh 线形状由(15)式决定。图2给出了炸药 PBX-9404 球面散心爆轰中,当传播到 $R=5$ cm 时的 $F \sim \Phi$ 曲线(中间三条线)。由图中可以看出, $a\Delta R$ 越小,曲线越偏左边, $a\Delta R$ 越大,曲线越偏右边。其间存在一最佳值 $(a\Delta R)^*$, 它使曲线连续过渡到声速点,这时,反应区内的压力、速度和密度等参数连续单调过渡到声速点状态。当 $a\Delta R < (a\Delta R)^*$ 时,积分曲线在声速点左边与 Rayleigh 线相交,这时 $q=0$, 因为 F 总是增加的,所以,一定沿 Rayleigh 线向上达到声速点。当 $a\Delta R > (a\Delta R)^*$ 时,积分曲线在声速点右边与 Rayleigh 线相交,

值得注意的是,这里有关系式

$$E = \rho_0 e$$

所以

$$e = \frac{1}{\rho_0} E e_0 = \frac{1}{\rho_0} E_s (\Phi_0, T_0)$$

根据(16)、(17)可得

这时 $q=0$, 因为 F 总是增加的,所以,一定沿 Rayleigh 线向上达到声速点,但这时 Φ 将减少,所以 $dF/d\Phi < 0$, 结合(13)和(14)式可得 $du/dR < 0$, 由人为粘性定义知道当时 $du/dR < 0, q \neq 0$, 与 Rayleigh 线上 $q=0$ 相矛盾,所以当 $a\Delta R > (a\Delta R)^*$ 时,没有物理解。

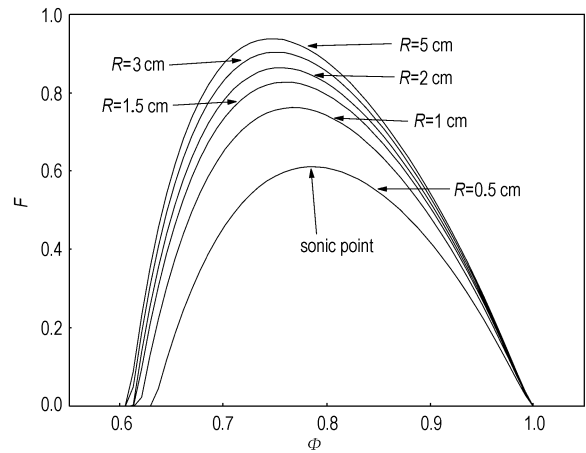


图1 散心爆轰波中不考虑人为粘性的 Rayleigh 线
Fig.1 Rayleigh lines without consideration of artificial viscosity for divergent detonation

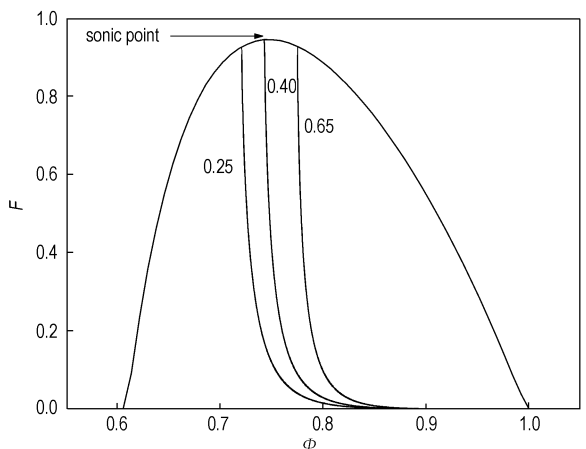


图2 散心爆轰中考虑人为粘性时 $R=0.5$ cm 处的 Rayleigh 线
Fig.2 Rayleigh lines with consideration of artificial viscosity for divergent detonation when R equals to 0.5 cm

表 3 散心爆轰中不同半径 R 处的最佳值 $(a\Delta R)^*$

Table 3 Optimum values of various radii for divergent detonation

R/cm	0.2	0.3	0.5	1.0	1.5	2.0	3.0	5.0
$(a\Delta R)^*$	1.2	0.9	0.7	0.6	0.5	0.43	0.41	0.4

利用数值方法,可以求出不同半径 R 处的最佳值 $(a\Delta R)^*$, (见表 3)。其拟合关系式为:

$$(a\Delta R)^* = 0.38774 + 0.5301e^{-R/0.95958} + 3.87862e^{-R/0.08636} \quad (20)$$

上式就是散心爆轰中人为粘性系数与空间步长应满足的匹配关系式,它随波面半径 R 的变化而变化(见图 3)。由于该式是以近似关系式(1)为条件的,所以,严格讲,该式也是近似的。

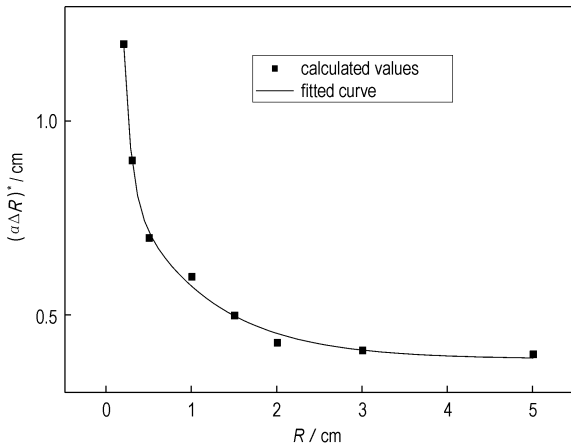


图 3 最佳值 $(a\Delta R)^*$ 随波面半径 R 的变化曲线
Fig. 3 Curve of optimum values versus front radius

5 算例

本文利用 C L Mader^[9] 所介绍的算法(SIN),编写了计算程序,对 PBX-9404 炸药计算了一维球面散心爆轰波。 $t = 0$ 时刻,在球心处半径为 0.5 cm 范围内给定 CJ 起爆条件: $\rho = \rho_{CJ}, p = p_{CJ}, F = 1$,球心处为固壁边界,外边界为自由面,药球半径取 8 cm。

图 4 中显示了网格尺寸分别是 $\Delta R = 1/5, 1/10, 1/20$ mm 时,根据人为粘性系数和空间网格的匹配关系(20)式的计算结果。可以看出,对于不同的空间网格大小,只要网格尺寸和人为粘性系数满足相同的匹配关系,那么数值模拟所得的结果也大致相同,这与前面的分析相一致。

由图 4 可以看到,球面散心爆轰波的爆压是随波面半径 R 的增大而增大,并逐渐接近平面爆轰波的爆压,爆压在半径小于 3 cm 之内的区域变化比较剧烈。

此结果与前文分析及相关文献结论一致。

为比较不同人为粘性对计算结果的影响,本文对采用恒定人为粘性系数($a = 25, 36$)和根据匹配关系计算出的人为粘性系数几种不同条件下的散心爆轰进行了模拟计算。压力峰值随波面曲率半径 R 的变化如图 5 所示。可以看出,当采用恒定人为粘性系数时,计算所得的压力峰值与根据匹配关系计算所得的压力峰值有较大偏差。所以,在散心爆轰的数值模拟中,人为粘性系数取恒定值是不合适的,而应利用本文所给出的人为粘性系数和空间网格的匹配关系(20)式选取不同半径处合适的人为粘性系数。

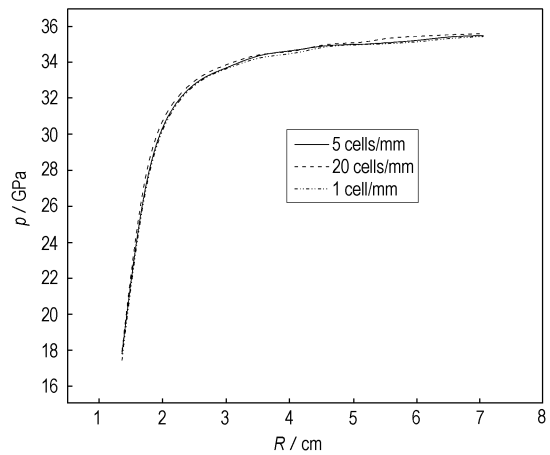


图 4 网格尺寸为 $\Delta R = 1/5, 1/10, 1/20$ mm 时,压力峰值随波面曲率半径 R 的变化

Fig. 4 Curve of detonation pressure versus front radius when mesh size equals to 1/5, 1/10 and 1/20 mm respectively

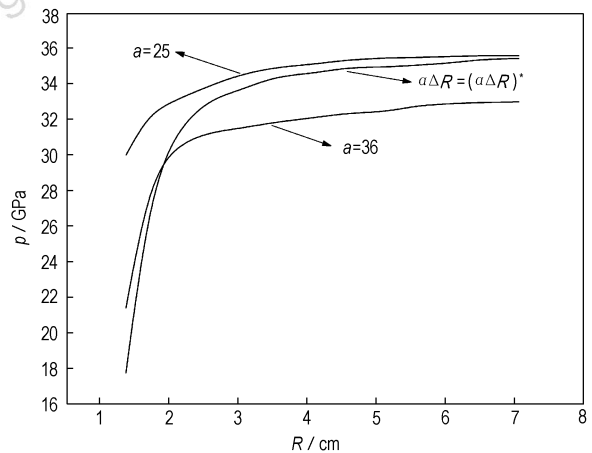


图 5 不同人为粘性条件下,压力峰值随波面曲率半径 R 的变化

Fig. 5 Curve of detonation pressure versus front radius under the conditions of different artificial viscosities

6 结 论

采用应用比较广泛的冯·诺曼人为粘性、Lee-Tarver 反应率函数和 JWL 状态方程,对散心爆轰数值模拟中的人为粘性进行了研究,得出了散心爆轰数值模拟中人为粘性系数与空间步长的匹配关系。结果表明:距球心越近的计算单元,其人为粘性系数应越大。远离球心处的计算单元,其粘性系数接近一维平面情形。对炸药 PBX-9404 球面散心爆轰过程的数值模拟证明了本文所给出的人为粘性系数与空间步长之间的匹配关系的正确性。

当波面半径较大时,反应区宽度远小于波面曲率半径,散心爆轰波的面积效应较小,其传播过程接近于平面情况,所以应用本文所给的匹配关系进行数值模拟能够得到比较正确的结果;当波面半径较小时,反应区宽度与波面曲率半径的量级相当,散心爆轰波的面积效应较大,这时应用本文所给的匹配关系进行数值模拟存在一定的问题,因此此项工作还有待于进一步研究。

参考文献:

- [1] 章冠人,陈大年. 凝聚炸药起爆动力学[M]. 北京:国防工业出版社,1991.
ZHANG Guan-ren, CHEN Da-nian. Detonation Dynamics of Agglomerate Detonator[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1991.
- [2] Mader C L. Detonation wave interactions [A]. 7th International Symposium on Detonation [C], Virginia: Naval Surface Weapons Center, 1981.
- [3] 刘尔岩,王元书. 高能炸药散心爆轰波绕射传播的数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2000, 20(1): 64 - 67.

- LIU Er-yan, WANG Yuan-shu. Numerical simulation of diffraction of a divergent detonation[J]. *Explosive and Shock Waves*, 2000, 20(1): 64 - 67.
- [4] 孙承伟. 自持的和活塞驱动的散心爆轰波[J]. 爆炸与冲击, 1987, 7(1): 15 - 26.
SUN Cheng-wei. Self-supported and piston-driven divergent detonation waves[J]. *Explosive and Shock Waves*, 1987, 7(1): 15 - 26.
- [5] 李智伟,刘邦弟. 散心爆轰的数值模拟[J]. 计算物理, 1985, 2(1): 55 - 66.
LI Zhi-wei, LIU Bang-di. Numerical modeling of divergent detonation waves[J]. *Computational Physics*, 1985, 2(1): 55 - 66.
- [6] 曹菊珍. 爆轰波数值计算中人为粘性与空间步长的匹配关系[J]. 爆炸与冲击, 1986, 6(2): 137 - 142.
CAO Ju-zhen. Relation between artificial viscosity and mesh size in numerical modeling of detonation [J]. *Explosive and Shock Waves*, 1986, 6(2): 137 - 142.
- [7] 朱建士,魏振典,周德忠. 定常爆轰数值模拟中人为粘性与人为反应率的选取[J]. 爆炸与冲击, 1983, 3(1): 21 - 26.
ZHU Jian-shi, WEI Zhen-dian, ZHOU De-zhong. Artificial viscosity and rate of reaction on numerical modeling of steady detonation [J]. *Explosive and Shock Waves*, 1983, 3(1): 21 - 26.
- [8] 刘尔岩. 常爆轰数值模拟中化学反应率与人为粘性的相关性[J]. 爆炸与冲击, 1985, 5(3): 35 - 41.
LIU Er-yan. Relation between artificial viscosity and chemical reaction rate law in numerical simulation of steady detonation [J]. *Explosive and Shock Waves*, 1985, 5(3): 35 - 41.
- [9] Mader C L. Numerical Modeling of Detonation [M]. Los Angeles: University of California Press, 1979.
- [10] Cheret R, Verder G. Divergent spherical detonation wave in a solid explosive [A]. 5th International Symposium on Detonation [C], Virginia: Office of Naval Research, 1970, 31 - 39.
- [11] 孙锦山,朱建士. 理论爆轰物理[M]. 北京:国防工业出版社,1995.
SUN Jin-shan, ZHU Jian-shi. Theory of Detonation Physics [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1995.

Matched Relationship between Artificial Viscosity and Mesh Size in Numerical Modeling of Divergent Detonation Wave

SUN Hai-quan¹, ZHANG Wen-hong²

(1. Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China;

2. Institute of Applied physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: In the numerical modeling of divergent detonation, the matched relationship between the viscosity and the mesh size was studied in terms of the Lee-Tarver's reaction rate and JWL equation of state. The results indicate that the artificial viscosity is higher near the center and tends to be one dimensional plane far from the center. Moreover, spherical divergent detonation of PBX-9404 explosive was simulated. And the results are in agreement with the characteristics of divergent detonation.

Key words: explosion mechanics; divergent detonation; numerical modeling; artificial viscosity; mesh size